

T H E S E S

présentées

A L A F A C U L T E D E S S C I E N C E S

D E L ' U N I V E R S I T E D E N A N C Y

pour obtenir

L E G R A D E D E D O C T E U R - I N G E N I E U R

par

Francis BIBIAN

Ingenieur Civil des Mines

1^{ère} THESE : AJUSTEMENT OPTIMAL DES PARAMETRES PHYSIQUES D'UNE LOI THEORIQUE
D'APRES DES OBSERVATIONS EXPERIMENTALES. APPLICATION A QUELQUES
CAS CONCRETS

2^{ème} THESE : PROPOSITIONS DONNEES PAR LA FACULTE

Soutenues le Octobre 1966 devant la Commission d'Examen

MM. G. CHAMPIER

Président

B. DEVIOT

C. PAIR

} Examineurs

A. HERPIN

M. TOURNARIE

} Invités



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41555023_0015

T H E S E S

présentées

A L A F A C U L T E D E S S C I E N C E S

D E L ' U N I V E R S I T E D E N A N C Y

pour obtenir

L E G R A D E D E D O C T E U R - I N G E N I E U R

par

Francis BIBIAN

Ingenieur Civil des Mines

1ère THESE : AJUSTEMENT OPTIMAL DES PARAMETRES PHYSIQUES D'UNE LOI THEORIQUE
D'APRES DES OBSERVATIONS EXPERIMENTALES. APPLICATION A QUELQUES
CAS CONCRETS

2ème THESE : PROPOSITIONS DONNEES PAR LA FACULTE

Soutenues le Octobre 1966 devant la Commission d'Examen

MM. G. CHAMPIER

Président

B. DEVIOT

C. PAIR

} Examineurs

A. HERPIN

M. TOURNARIE

} Invités

Doyen : M. AUBRY

Assesseur : M. GAY

Doyens honoraires : MM. CORNUBERT - DELSARTE - URION - ROUBAULT.

Professeurs honoraires : MM. CROZE - RAYBAUD - LAFFITTE - LERAY - JULY - LAPORTE - EICHHORN - GODEMENT - DUBREUIL - L. SCHWARTZ - DIEUDONNE - DE MALLEMANN - LONGCHAMBON - LETORT - DODE - GAUTHIER - GOUDET - OLMER - CORNUBERT - CHAPELLE - GUERIN - WAHL.

Maîtres de conférences honoraires : MM. LIENHART - PIERRET.

Professeurs

MM.	URION	Chimie biologique	* MALAPRADE	Chimie
	DELSARTE	Analyse supérieure	MANGENOT	Botanique
	ROUBAULT	Géologie	GAYET	Physiologie
	CAPELLE	Mécanique rationnelle	BONVALET	Mécanique appliquée
	VEILLET	Biologie animale	HADNI	Physique
	BARRIOL	Chimie théorique	* BASTICK	Chimie
	BIZETTE	Physique	* KERN	Minéralogie
	GUILLIEN	Electronique	DUCHAUFOR	Pédologie
	GIBERT	Chimie physique	GARNIER	Agronomie
	LEGRAS	Mécanique rationnelle	* WEPPE	Minéralogie appliquée
	BOLFA	Minéralogie et cristallographie	NEEL	Chimie organique industrielle
	NICLAUSE	Chimie	BERNARD	Géologie appliquée
	FAIVRE	Physique appliquée	* CHAMPIER	Physique
	AUBRY	Chimie minérale	* GAY	Chimie biologique
	COPPENS	Radiogéologie	* REGNIER	Physico-chimie
	DUVAL	Chimie	STEPHAN	Zoologie
	FRUHLING	Physique	* CONDE	Zoologie
	HILLY	Géologie	* WERNER	Botanique
	LE GOFF	Génie chimique	EYMARD	Calcul différentiel et intégral
	SUHNER	Physique expérimentale	LEVISALLES	Chimie organique
	CHAPON	Chimie biologique	Mme HERVE	Méthodes mathématiques de la physique
	HEROLD	Chimie minérale industrielle		
	SCHWARTZ B.	Exploitation minière	* GOSSE	Mécanique physique
			FELDEN	Physique

* Professeur titulaire à titre personnel

Maîtres de Conférence

Mme	BASTICK	Chimie M.P.C. (Epinal)
MM.	GUDEFIN	Physique
	ROCCI	Géologie
	VUILLAUME	Psychophysiologie
	FRENTZ	Biologie animale
	HORN	Physique propédeutique
	LAFON	Physique (I.S.I.N.)
	MARI	Chimie (I.S.I.N.)
	AUROUZE	Géologie
	DEVLOT	Physique du solide
	FLECHON	Physique M.P.C.
Mlle	HUET	Mathématiques S.P.C.N.
	VIGNES	Métallurgie
	BALESDENT	Thermodynamique chimique appliquée
	BLAZY	Minéralogie appliquée (E.N.S.G.)
	JANOT	Physique M.P.C. (Epinal)
	JACQUIN	Pédologie et chimie agricole
	MAINARD	Physique M.G.P.
	CACHAN	Entomologie appliquée (E.N.S.A.)
	MARTIN	Chimie M.P.C.

N...	Probabilités et statistiques
N...	Mécanique (I.S.I.N.)
N...	Mathématiques
N...	Mécanique expérimentale
N...	Génie chimique
N...	Mathématiques M.P.C.
N...	Mathématiques S.P.C.N.
N...	Mathématiques appliquées
N...	Mécanique des fluides (I.S.I.N.)
N...	Physiologie animale

REMERCIEMENTS

Je désire d'abord exprimer toute ma gratitude à Monsieur HERPIN, qui a bien voulu m'accueillir dans son Service de Physique du Solide et de Résonance Magnétique.

Je remercie Monsieur DEVIOT, qui a dirigé ce travail, et dont les encouragements m'ont permis de le mener à bonne fin.

Je tiens à témoigner toute ma reconnaissance à Monsieur TOURNARIE, qui m'a constamment guidé et conseillé tout au long de ce travail avec la plus extrême obligeance.

Monsieur CHAMPIER m'a fait l'honneur de présider la Commission d'Examen, et Monsieur PAIR a bien voulu en faire partie : je les en remercie très vivement.

Monsieur SOLAL m'a beaucoup aidé de ses conseils et suggestions pour la mise en programme de ce travail ; qu'il trouve ici l'expression de toute ma reconnaissance.



P L A N

NOTATIONS

INTRODUCTION

CHAPITRE I - CLASSIFICATION

I - PROBLEMES LINEAIRES

A - Problèmes stationnaires

B - Problèmes non stationnaires

II - PROBLEMES NON LINEAIRES

A - Problèmes linéarisables

B - Problèmes non linéarisables

CHAPITRE II - DETERMINATION DU COUT PROBABLE

I - CHAINE DE MESURE

II - CHOIX DU CRITERE

III - DEFINITION DE LA FONCTION DE COUT

A - Caractéristiques de la fonction de coût

B - Hypothèses simplificatrices

C - Fonction de coût choisie

CHAPITRE III - MINIMISATION DE LA FONCTION DE COUT

I - CHOIX DE LA METHODE

II - LA METHODE DU SIMPLEXE

- A - Principe
- B - Construction de la base initiale
- C - Régénération
- D - Choix des coefficients

III - RESULTATS

CHAPITRE IV - ESTIMATION DE LA MATRICE DE COVARIANCE

I - EXPRESSION DE LA MATRICE DE COVARIANCE

II - ESTIMATION DE LA MATRICE A

III - ESTIMATEURS DE QUALITES

CHAPITRE V - RESULTATS

I - SIMULATION D'EXPERIENCE

II - ETUDE DE LA VARIATION DES LARGEURS DE RAIES

ANNEXE A

ANNEXE B

ANNEXE C

ANNEXE D

BIBLIOGRAPHIE

NOTATIONS

A - GENERALITES

Lettre minuscule	nombre scalaire, indice	ε
lettre minuscule pointée	vecteur - colonne	x^*
lettre majuscule droite	matrice : opérateur linéaire	A
lettre majuscule cursive	opérateur non linéaire	$\mathcal{A}$
parenthèses	relation fonctionnelle	$\mathcal{A}(x^*)$
crochets	limitent un multiplicande	$[z-x]M[z-x]$
$\tilde{A}$	transposée de A	
$\dot{x}$	transposé de x^* : vecteur ligne	
u_i	vecteur colonne dont tous les termes sont nuls, sauf le $i^{\text{ème}}$, égal à 1	
$\max \{x_1 ; i = 1, n\}$	le plus grand des x_1 , $i \in [1, n]$	
$\overline{x^*}$	espérance mathématique de x^*	
A_{ij}	élément d'indices i et j de A.	

B - SIGNIFICATION DES SYMBOLES

A	matrice instrumentale	α	coefficient de la stratégie
e	base des log.népériens	δ	erreur systématique
E	matrice de covariance	ε	fonction de coût
f	erreur totale	$\bar{\varepsilon}$	erreur quadratique relative moyenne
n_x	nombre d'inconnues	σ	écart statistique moyen
n_y	nombre d'observations	π	$\pi = 3.14159265$
s	bruit gaussien	ϕ	erreur aléatoire

u_i^* vecteur dont la seule composante non nulle est la i ème

v élément d'hypervolume

w matrice de pondération des observations

x variables inconnues

X transformateur de bruit engendrant les inconnues

y observations effectuées

Y transformateur de bruit altérant les observations

z variables estimées.

INTRODUCTION

Les méthodes de mesure de la physique moderne consistent fréquemment en observations indirectes des grandeurs à mesurer. C'est-à-dire que les valeurs théoriques des observations sont des fonctions (souvent non linéaires) des inconnues ainsi que du (ou des) paramètres de mesure ; si y_j est la $j^{\text{ème}}$ observation correspondant aux paramètres expérimentaux $P_{j,1}, P_{j,2}, \dots, P_{j,n_p}$, sa valeur calculée $\widetilde{y}_j$ sera donnée par :

$$\widetilde{y}_j = f \left(P_{j,1}, P_{j,2}, \dots, P_{j,n_p} ; x_1, x_2, \dots, x_{n_x} \right)$$

$x_1, x_2, \dots, x_{n_x}$ représentant les n_x inconnues, ceci pour les n_y observations expérimentales.

Par exemple, dans un cliché Debye-Scherrer, l'observation j sera constituée par l'angle $2 \theta_j$, correspondant à la réflexion dont les indices h_j, k_j, l_j seront les paramètres $P_{j,1}, P_{j,2}, P_{j,3}$ tandis que les inconnues seront les paramètres réticulaires $a, c, \dots$ etc... du cristal.

A ce niveau se pose alors le problème de savoir comment, d'une part calculer "au mieux" ces paramètres théoriques, connaissant un certain nombre de résultats expérimentaux, entachés d'incertitude, d'autre part estimer l'écart statistique sur chacun de ces paramètres.

Ce problème se présente sous des aspects totalement différents selon la forme de la fonction reliant inconnues et observations.

Après un essai de classification de ces problèmes, nous nous attacherons de façon plus précise à la résolution des problèmes de la catégorie "non linéaire, non linéarisable".

Après avoir construit une "fonction de coût", nous chercherons à la minimiser par la méthode du "Simplexe", puis à estimer l'écart statistique probable sur chacun des paramètres. Nous examinerons enfin quelques-uns des résultats obtenus grâce à la méthode proposée.

CHAPITRE I

CLASSIFICATION

Les différents problèmes qui se présentent en pratique peuvent être classés suivant la forme mathématique de la dépendance inconnues-observations : cette dépendance peut en effet être soit linéaire, soit non linéaire.

I - PROBLEMES LINEAIRES

Ils sont décrits par l'équation matricielle :

$$\textcircled{1} \quad \vec{\tilde{y}} = A \vec{x}$$

où, de façon générale, la notation α représente le vecteur colonne $\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_n \end{bmatrix}$, A une matrice rectangulaire, et où $\vec{\tilde{\alpha}}$ est l'espérance mathématique de α .

Si n_y est la dimension du vecteur $\vec{\tilde{y}}$ et n_x celle du vecteur $\vec{x}$, les dimensions de A seront $n_y \times n_x$.

Ces problèmes peuvent être, ou non, stationnaires.

A - Problèmes stationnaires

D'une façon générale, on dit qu'une fonction (notamment une fonction aléatoire) est stationnaire si toutes ses propriétés statistiques sont invariantes pour tout changement de l'origine des indices.

Ceci s'exprime de la façon suivante : si $y_k = \sum_{\ell} A_{k\ell} x_{\ell}$ est la $k^{\text{ième}}$ observation, on a, quelque soit p

$$\sum_{\ell} A_{k\ell} x_{\ell+p} = y_{k+p} .$$

Une translation des inconnues revient donc à engendrer une translation équivalente des observations.

Wiener (1942), Tournarie (1956) ont utilisé ces propriétés pour résoudre le problème par des méthodes ayant l'avantage d'être rapides, et relativement peu encombrantes.

Mais ces méthodes sont fondées sur l'hypothèse de la connaissance d'observations en un nombre illimité de points.

Tournarie (1959) a pallié en partie ces inconvénients en montrant que dans le cas où les observations n'évoluaient plus aux bornes de l'intervalle il était équivalent de travailler sur des systèmes à permutation circulaire ou sur des systèmes infinis.

Cependant, avec l'accroissement des possibilités des calculateurs numériques, l'intérêt de ces méthodes ne compense plus l'inexactitude des hypothèses de base.

B - Problèmes non stationnaires

La matrice rectangulaire A ne présente plus alors aucune propriété particulière.

Pour que le système ① possède une solution définie, il faut qu'il existe dans A au moins un mineur $n_x \times n_x$ dont le déterminant soit différent de 0 .

A.M. Legendre (1806) imagina une méthode de résolution de ces systèmes, méthode qu'il a appelée "Méthode des Moindres Carrés".

K.F. Gauss (1809, 1810, 1821) donne les premières bases probabilistes à cette méthode, par une justification statistique fondée sur l'hypothèse que les erreurs aléatoires faites sur les observations suivent une loi de Laplace-Gauss.

Cette méthode conduit à l'inversion d'une matrice, de dimensions $n_x \times n_x$, qui résume, en quelque sorte, l'information, donnée par l'expérience, sur les différentes inconnues.

En pratique, cette matrice est fréquemment pseudo-singulière, et son inversion numérique entraîne beaucoup d'erreurs de chute, et surtout certains termes de la matrice de covariance deviennent très grands.

L'information que l'on possède a priori sur les inconnues peut être utilisée (Tournarie, 1958 b) pour pallier ces inconvénients.

L'estimateur optimal obtenu possède alors d'intéressantes propriétés.

1) Il est optimal pour chaque inconnue et donc pour toute forme linéaire des inconnues.

2) L'augmentation de l'écart statistique sur une inconnue à la suite de l'introduction d'inconnues auxiliaires est largement inférieure à l'augmentation que l'on observerait en appliquant la méthode des moindres carrés.

3) L'information préalable sur une inconnue peut être une certitude: il est alors très facile, sans avoir à modifier le formalisme, de bloquer cette inconnue à la valeur désirée en écrivant que l'écart statistique a priori sur cette inconnue est nul.

4) Enfin, dans le cas d'observations indépendantes successives, il est possible d'effectuer l'estimation optimale des inconnues au fur et à mesure qu'est connu le résultat des observations, le résultat étant identique à celui que l'on obtiendrait par un traitement global des observations (Tournarie, 1966b).

Un certain nombre de problèmes peuvent être traités par cette méthode avec suffisamment de rigueur. Citons par exemple :

- Estimation des paramètres réticulaires d'un cristal cubique, quadratique ou orthorhombique.

- Estimation de la répartition des cordes dans les cristallites à partir de la forme des réflexions des rayons X.

Pour des essais comparatifs, des exemples déjà étudiés (Linnik, 1963), ont été aussi repris par cette méthode, notamment l'estimation du temps de réaction des conducteurs d'après les longueurs de freinage.

II - PROBLEMES NON LINEAIRES

La dépendance inconnues-observations se présentent alors sous la forme d'un opérateur non linéaire :

$$\tilde{y}^* = \mathcal{A}(x^*) .$$

On peut également distinguer dans ce cas deux catégories : problèmes "linéarisables" et problèmes "non linéarisables", bien qu'en pratique, la frontière entre ces deux catégories ne soit pas très nettement précisée. Certains

problèmes présentent en effet un très court rayon de convergence, restreignant d'autant l'intérêt de la linéarisation.

A - Problèmes linéarisables

La linéarisation permet de résoudre le problème par itérations successives, chaque itération étant constituée des opérations suivantes :

. Développement en série de Taylor, au voisinage du point x_1^* , dans l'espace des inconnues.

. Résolution de ce système linéaire, ce qui donne les coordonnées du point x_{i+1}^* , sommet de l'hyper-paraboloïde osculateur à la fonction de coût définie p.11.

Le développement est en général limité aux dérivées premières. Mais on peut tenir compte aussi des dérivées secondes qui interviennent dans les infiniments petits du 1er ordre, ce qui a l'avantage de faire converger vers la solution (Gaugenot, Guillou et Lago, 1961).

En revanche, cette méthode diminue le rayon de convergence et entraîne des calculs beaucoup plus importants, en temps et en place (nécessitant en effet les $n(n-1)$ dérivées secondes) .

L'annexe D met en évidence, sur des cas précis, cette diminution du rayon de convergence due à l'introduction des dérivées secondes.

B - Problèmes non linéarisables

Certains problèmes ne se prêtent pas, ou se prêtent mal, à cette linéarisation.

Considérons par exemple (Lattes, 1956) l'étude de la décroissance

simultanée de l'activité de plusieurs corps radio-actifs. La loi de cette décroissance peut s'écrire, dans le cas de 2 corps

$$f(t) = A e^{-\lambda t} + B e^{-\mu t} .$$

Il est clair qu'il est vain d'espérer atteindre par exemple B par des observations (inévitavelmente entachées d'incertitude), pour n'importe quel ensemble de valeurs A, λ et μ .

Nous avons été ainsi amenés à chercher une méthode ne présentant pas ces inconvénients et capable d'estimer "au mieux" les paramètres de n'importe quelle loi théorique.

CHAPITRE II

DETERMINATION DU COUT PROBABLE

Après avoir étudié la structure générale d'une chaîne de mesure, nous définirons un certain critère de qualité, d'après lequel nous pourrions construire une "fonction de coût".

I - CHAÎNE DE MESURE

La structure essentielle la plus courante d'une chaîne est entièrement décrite (Tournarie, 1965) par le schéma de la figure 1 .

Elle comprend un appareil fournissant, à partir des inconnues x^* et des paramètres de commande p^* , des observations y^* , suivant la relation :

$$\tilde{y}^* = \mathcal{A}(x^*, p^*)$$

où $\tilde{y}^*$ est l'espérance mathématique de y^* .

Les observations y^* sont obtenues par l'adjonction à $\tilde{y}^*$ d'un tirage au hasard, représenté par une fonction $\mathcal{Y}$ de variables aléatoires s^* (que nous pouvons supposer suivre une loi de Laplace - Gauss normale, sans restreindre la généralité de l'exposé, $\mathcal{Y}$ n'étant pas nécessairement linéaire)

$$y^* = \tilde{y}^* + \mathcal{Y}(s^*) .$$

Cette fonction peut être par exemple une application linéaire, représentée par une matrice carrée Y : on a alors un bruit gaussien. Si cette matrice est diagonale, on a un bruit blanc gaussien.

Les inconnues x^* peuvent être considérées elles-mêmes comme obtenues par un tirage au hasard centré sur les hypothèses h^* , tirage que l'on peut également représenter par le résultat d'un opérateur $\mathcal{K}$ sur des variables aléatoires s^* normales :

$$x^* = h^* + \mathcal{K}(s^*) .$$

Ce schéma de génération des inconnues permet d'exploiter l'information a priori que l'on possède en général sur chacune des inconnues : en effet, on est sûr, par exemple, qu'une concentration relative sera toujours comprise entre 0 et 1, qu'une énergie sera toujours positive ou nulle, qu'une distance interatomique ne peut descendre en deçà d'un certain minimum, etc... Ces informations correspondent à une densité de probabilité de $\mathcal{K}(s^*)$ nulle en dehors des intervalles permis.

Les estimations z^* des inconnues x^* sont obtenues à partir des observations y^* par un opérateur $\mathcal{B}$:

$$z^* = \mathcal{B}(q^*, y^*) ,$$

où q^* représente les paramètres caractérisant l'opérateur $\mathcal{B}$ (par exemple, limites de la bande passante si $\mathcal{B}$ est un filtre, coefficients B_{ij} de la matrice si $\mathcal{B}$ est une application linéaire).

Enfin, la qualité de l'estimation z^* réalisée, est donnée par la valeur d'une fonction scalaire $\mathcal{E}$, donnant le coût ε de l'erreur :

$$\varepsilon = \mathcal{E}(h^*, x^*, z^*, y^*) .$$

Dans le cas le plus général, cet opérateur fait donc intervenir les opérateurs $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{X}$ et $\mathcal{Y}$.

Trouver la solution optimale revient ainsi à trouver le vecteur z^* pour lequel la fonction de coût ε , traduisant un certain critère de qualité, est minimale.

II - CHOIX DU CRITERE DE QUALITE

Une méthode est optimisée si les paramètres "libres", c'est-à-dire laissés au choix de l'utilisateur, répondent aux conditions d'un certain critère de qualité.

Ce critère doit tout d'abord traduire exactement ce que l'on recherche: en particulier, nous chercherons à nous approcher "au mieux" non pas des observations y^* , mais des inconnues x^* .

Ensuite, ce critère doit conduire à des équations que l'on peut résoudre avec un volume raisonnable de calculs.

Enfin, il doit être tel que, appliqué à un problème linéaire, il permette de retrouver les mêmes résultats que l'algorithme optimal.

III - DEFINITION DE LA FONCTION DE COÛT

A - Caractéristiques de la fonction de coût

Nous allons donc définir une fonction

$$\varepsilon = \mathcal{E}(h^*, x^*, z^*, y^*) ,$$

d'autant plus grande que les estimations z^* sont plus éloignées des inconnues x^* , et telle que les estimations correspondant au minimum de cette fonction répondent au critère de qualité choisi.

Dans un système linéaire (Tournarie, 1966 a), on peut décrire le même critère de qualité dans plusieurs espaces différents.

a) - Dans l'espace des inconnues, le critère optimal consiste à trouver la forme linéaire des observations

$$z_0^* = b^* + B y^* ,$$

qui minimise la variance probable autour de la solution exacte, variance qui s'écrit :

$$\overbrace{(z^* - x^*)} \quad M \quad (z^* - x^*) ,$$

où M est une matrice semi-définie positive.

b) - Dans l'espace du générateur de bruit de fond s^* , le critère optimal consiste à se donner une séquence z^* pour x^* , d'après laquelle on peut remonter à l'état $\underline{s}^*$.

Cet état $\underline{s}^*$ (noté ainsi pour le distinguer du vrai s^*) est donc une fonction de z^* .

On choisit alors z_0^* tel que l'état $\underline{s}_0^*$ dont il résulterait corresponde à la probabilité maximale qui s'écrit :

$$p(s^*) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^{(n_x+n_y)}} e^{-\frac{1}{2} s^* s^*}.$$

Ces deux points de vue conduisent, dans un système linéaire, aux mêmes estimations z_0^* .

Dans un premier temps, nous avons cherché à minimiser la variance de z^* . Dans un système non linéaire, cette variance s'écrit :

$$\varepsilon = \int \sum_{k=1}^{n_x} \omega_k \left[u_h [B(q^*, A(p^*, h^* + \mathcal{H}(s^*)) + \mathcal{Y}(s^*)) - x^*] \right]^2 \frac{e^{-\frac{1}{2} s^* s^*}}{\sqrt{2\pi}^{(n_x+n_y)}}$$

Minimiser cette variance revenait à chercher l'opérateur $\mathcal{B}$ tel que :

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathcal{B}} = 0.$$

soit encore :

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial q^*} = 0.$$

Ce point de départ conduit ainsi à des calculs inextricables : en particulier, on est conduit à résoudre un système constitué par des dérivées d'intégrales n-uples égalées à 0.

Nous avons été ainsi amenés à rechercher z^* tel que la probabilité de s^* soit maximale (ce qui revient à minimiser, par rapport à z^* , l'expression $s^* s^*$).

B - Hypothèses simplificatrices

Pour calculer l'expression du coût, nous avons été conduits à formuler plusieurs hypothèses, tant sur les observations que sur les inconnues :

1ère HYPOTHESE : Tout d'abord, nous supposerons qu'il n'y a pas de corrélations entre $\mathcal{Y}(s^*)$ et $\mathcal{X}(s^*)$, ce qui revient à dire que l'erreur sur la $j^{\text{ème}}$ observation est sans influence sur la valeur de la $k^{\text{1ème}}$ inconnue, hypothèse qui paraît en soi assez naturelle. Autrement dit, nous supposerons toujours :

$$(\cdot s) \tilde{\mathcal{H}} \mathcal{Y}(s^*) = 0 .$$

L'expression $s^* s^*$ s'écrit alors :

$$s^* s^* = \sum_{i=1}^n \left[u_i \mathcal{H}^{-1}(z^*) \right]^2 + \sum_{j=1}^n \left[u_j \mathcal{Y}^{-1}(y^* - \mathcal{A}(p^*, z^*)) \right]^2$$

$$s^* s^* = \text{Tra} (\mathcal{H}^{-1}[z^* - x^*][z^* - x^*] \tilde{\mathcal{H}}^{-1}) + \text{Tra} (\mathcal{Y}^{-1}[y^* - \mathcal{A}z^*][y^* - \mathcal{A}z^*] \tilde{\mathcal{Y}}^{-1}) .$$

2ème HYPOTHESE : Ensuite, nous supposerons également les erreurs sur y^* sans corrélations entre elles, ce qui est, ici aussi, généralement le cas en pratique. L'opérateur $\mathcal{Y}$ se représente alors par une simple matrice diagonale. (En fait, si l'opérateur est linéaire, on peut toujours le diagonaliser en recherchant la matrice T telle que $T\mathcal{Y}T^{-1}$ soit une matrice diagonale : on prendra alors comme observations le vecteur Ty^*).

Mais dans certains cas, la loi de répartition des erreurs expérimentales $\mathcal{Y}(s^*)$ ne sera plus symétrique ; il faudra alors modifier la fonction de coût en conséquence. C'est le cas par exemple lorsqu'on a affaire à des comptages de quanta très peu nombreux, qui suivent la loi du Poisson. La loi de Laplace - Gauss donne en effet une probabilité non nulle d'avoir des comptages de quanta négatifs. Cependant, en fait, cette probabilité est très faible, et devient de plus rigoureusement nulle du point de vue ordinateur, dès que le nombre de quanta dépasse 180 . De sorte que cette loi sera souvent suffisamment approchée et $\mathcal{Y}$ sera en général représenté par une matrice diagonale.

3ème HYPOTHESE : Enfin, nous supposerons également les incertitudes à priori sur x sans corrélations entre elles, hypothèse qui, elle, est assez restrictive. Cependant, par un choix convenable de l'équation du phénomène, on peut arriver à atténuer cet inconvénient : par exemple, si les inconnues sont les paramètres a et c d'un cristal quadratique, on a, en général, une bonne information préalable sur la valeur du rapport $\frac{c}{a}$. On peut aisément exploiter cette information en choisissant comme inconnues a et $\frac{c}{a}$.

D'autre part, une loi de Laplace - Gauss n'est plus ici, satisfaisante : en effet, d'une part, la densité de probabilité n'est plus forcément symétrique, et d'autre part, il y a presque toujours des limites absolues, c'est-à-dire un support borné, la valeur la plus probable n'étant pas en général au milieu de ce support.

On a ainsi trois points par lesquels doit passer la fonction. Pour des raisons de simplicité, le mode de raccordement a été piloté par un seul paramètre ; par analogie avec la méthode linéaire, ce paramètre a été choisi de façon à coïncider avec l'écart-type de la loi de Laplace - Gauss lorsque les bornes sont rejetées à l'infini, et à être tel que la fonction de probabilité ait la même courbure au sommet que cette même loi.

C - Fonction de coût choisie

La loi de répartition la plus simple répondant à ces critères est de la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} p(z) = C_n e^{-\frac{(z-x_c)^2}{dx^2} \frac{(x_c-x_1)(x_s-x_1)}{(z-x_1)(x_s-z)}} \frac{ds}{dz}, \text{ si } x_1 \leq z \leq x_c \\ p(z) = 0, \text{ sinon} \end{array} \right.$$

où x_c correspond à la valeur la plus probable
 x_l correspond à la borne inférieure
 x_s correspond à la borne supérieure
 dx correspond à l'incertitude sur $x^{(i)}$
 C_n est tel que :

$$C_n \int p(z) dz = 1 .$$

} de $x^{(i)}$

Cette loi de répartition n'autorise que des limites portant indépendamment sur chaque inconnue, et conduit par conséquent à un domaine permis de forme parallélépipédique.

Il est possible de construire des lois à limites ellipsoïdales d'orientation quelconque, mais elles présentent l'inconvénient de nécessiter beaucoup plus de calculs (le temps est multiplié par le nombre d'inconnues) et d'ailleurs considérablement l'entrée des données.

Finalement, la fonction de coût à minimiser :

$$C = -2 \ln \varepsilon = \dot{s}_x \dot{s}_x + \dot{s}_y \dot{s}_y ,$$

peut s'écrire, compte tenu de toutes ces hypothèses :

$$C = \sum_{i=1}^n \frac{(z^{(i)} - x_c^{(i)})^2}{(dx^{(i)})^2} \frac{(x_c^{(i)} - x_l^{(i)})(x_s^{(i)} - x_c^{(i)})}{(z^{(i)} - x_l^{(i)})(x_s^{(i)} - z^{(i)})} + \sum_{j=1}^N \left[\frac{y_j - u_j(z^*)}{dy_j} \right]^2 .$$

CHAPITRE III

MINIMISATION DE LA FONCTION DE CÔUT[^]

La fonction de coût ainsi construite, il s'agit de déterminer quelles sont les valeurs des paramètres pour lesquels cette fonction est minimale. Le choix de la méthode de minimisation est guidé par un certain nombre de critères que nous allons examiner.

I - CHOIX DE LA METHODE

La forme de la fonction à minimiser excluait d'office un certain nombre de méthodes classiques. En effet, il n'était pas question d'utiliser une méthode utilisant le gradient : il aurait fallu pour cela, connaître les dérivées de la fonction de coût par rapport à chacune des variables, ce qui aurait représenté dans tous les cas un très gros travail analytique et numérique, et qui de plus, pour certaines lois théoriques, n'aurait pas été possible, les dérivées de l'opérateur instrumental n'étant pas calculables par des fonctions classiques.

Il ne restait donc que les méthodes utilisant une approximation numérique pour estimer les dérivées, ou alors il nous fallait employer un algorithme ne faisant pas usage des dérivées.

Les premières méthodes sont largement inspirées de celles utilisant les dérivées analytiques. Parmi les plus classiques, on peut citer :

- La méthode de l'hyperparaboloïde tangent : ce dernier est recherché à partir des dérivées premières calculées au point de départ. Le nouveau point d'essai est pris au minimum de cet hyperparaboloïde. Le plus gros inconvénient de cette méthode est que son rayon de convergence est fini : elle peut donc diverger ou cycler, suivant les cas. Par contre, il n'est pas besoin de choisir un pas.

- La méthode de la plus grande pente : un pas étant choisi, on se déplace de ce pas dans la direction du gradient calculée au point de départ.

Mais le choix du pas de départ est délicat et quelque peu arbitraire : trop petit au départ, il se révèle souvent trop grand près du minimum. Pour remédier à cet inconvénient, on utilise fréquemment une variante, dite du pas variable, où le pas est multiplié par un facteur $k_1 > 1$ si le nouveau point est plus bas, et par un facteur k_2 tel que $k_2 < \frac{1}{k_1}$ si le point est plus haut.

L'avantage de ces méthodes est qu'elles ne peuvent diverger, étant donné que l'on ne retient un nouveau point que s'il est plus bas que le précédent.

Toutes ces méthodes nécessitant le calcul numérique des dérivées, ces dernières doivent être continues ; d'autre part leur estimation pose le délicat problème de l'intervalle optimal pour cette estimation : en effet, un intervalle trop petit fait intervenir très rapidement les erreurs de chute inévitables sur le calcul de la fonction, tandis qu'un intervalle trop grand donne bien entendu une estimation d'autant plus biaisée que la courbure de la fonction est plus grande.

Enfin, elles se prêtent très mal à la minimisation de fonctions discontinues : or, par suite de leur calcul numérique, forcément limité à un certain nombre de chiffres significatifs, toutes les fonctions sont en fin de compte discontinues, en "marche d'escalier".

Nous avons donc cherché une méthode qui atténuerait ces inconvénients sans trop allonger, si possible, le temps de calcul.

III - LA METHODE DU SIMPLEXE

La méthode originale du Simplexe, présentée par Dantzig en 1949, permet de minimiser une fonction linéaire de n variables soumises à des contraintes (problème de la "programmation linéaire").

Divers auteurs l'ont améliorée (Dantzig, 1951 ; Lemke - Carlton, 1954 ; Dantzig 1966), ou étendue aux problèmes de "programmation quadratique" (Franck et Wolfe 1956 ; Barankin et Dorfmann, 1958 ; Wolfe, 1959).

Ce n'est que récemment que, reprenant une idée de Spendley, Hext et Himsworth (1962), Nelder et Mead (1965) ont proposé un algorithme utilisant le même principe pour minimiser des fonctions quelconques, avec la seule hypothèse qu'elles présentent un minimum unique dans la région étudiée.

Par contre, aucune hypothèse n'est requise sur sa dérivabilité, ni même sur sa convexité.

A - Principe

Le simplexe est défini par une base, supposée non dégénérée, de $n+1$ points de l'ensemble des variables : soient x_1^* , x_2^* , ..., x_i^* , ..., x_{n+1}^* .

A chaque point x_i^* correspond la valeur de la fonction en ce point, soit $y_i = f(x_i^*)$.

Posons :

$$y_s = \max_i \{ y_i ; i = 1, n+1 \}$$
$$y_m = \min_i \{ y_i ; i = 1, n+1 \} .$$

Soit $\bar{x}^*$ le centre de gravité des n points x_1^* tels que $i \neq s$, et affectés du poids unité.

Des deux points x_s^* et $\bar{x}^*$ nous déduisons, par combinaison linéaire, un point d'essai $x^{* *}$:

$$x^{* *} = (1 - \alpha) \bar{x}^* + \alpha x_s^* ,$$

où α est un certain paramètre, caractérisant la "stratégie" de l'essai. Notons que, quelque soit α , les trois points $x^{* *}$, $\bar{x}^*$ et x_s^* sont alignés.

Le premier essai est un essai de "réflexion" :

$$x^{* *} = (1 - \alpha_r) \bar{x}^* + \alpha_r x_s^* ,$$

où α_r est le coefficient de réflexion.

On calcule $y^* = f(x^{* *})$, que l'on compare à y_m .

@ - Si $y^* < y_m$: alors (la réflexion étant un succès) on poursuit dans la direction prise, en définissant :

$$x^{* **} = (1 - \alpha_e) \bar{x}^* + \alpha_e x_s^* ,$$

où α_e est le coefficient d'expansion.

On calcule $y^{**} = f(x^{* **})$.

1) Si $y^{**} < y^*$: l'expansion est elle aussi un succès, cependant l'on ne poursuit pas, car cela aurait pour effet de "geler" le simplexe dans la direction prise. On remplace x_s^* par $x^{* *}$ et l'on recommence avec cette nouvelle base.

2) Sinon, $y^{**} > y_s^*$: l'expansion a été un échec, on remplace x_s^* par x^{**} et l'on recommence avec cette nouvelle base.

① - Sinon $y^* > y_m$: la réflexion est un échec. Soit ℓ tel que :

$$y_\ell = \max_i \{y_i ; i \neq s, i = 1, n+1\} .$$

1) Si $y^* < y_\ell$: alors on remplace x_s^* par x^{**} et l'on recommence.

2) Sinon, $y^* > y_\ell$: la procédure de réflexion est en échec complet. On remplace dans ce cas x_s^* par celui des deux, x_s^* ou x^{**} qui donne le plus petit y , et l'on forme :

$$x^{**} = (1 - \alpha_c) \bar{x}^* + \alpha_c x_s^* ,$$

où α_c est le coefficient de contraction.

Posons $y^{**} = f(x^{**})$

$\alpha)$ Si $y^{**} < y_s$, alors on remplace x_s^* par x^{**} et l'on recommence.

$\beta)$ Sinon, $y^{**} > y_s$: le simplexe se heurte à une grosse difficulté : on effectue alors une contraction complète autour de x_m^* , en remplaçant tous les x_i^* , $i \neq m$, par $\frac{x_i^* + x_m^*}{2}$, et l'on recommence la procédure avec cette nouvelle base.

B - Construction de la base initiale

Il s'agit de construire une base régulière dans l'espace des variables.

Pour cela, on se donne n pas δ^1 , et l'on construit la base à partir du point de départ x^* , de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \cdot x_1 &= (x^1, x^2, \dots, x^1, \dots, x^n) = \cdot x \\ \cdot x_2 &= (x^1 + \delta^1, x^2, \dots, x^1, \dots, x^n) \\ \cdot x_3 &= (x^1, x^2 + \delta^2, \dots, x^1, \dots, x^n) \\ &\vdots \\ \cdot x_1 &= (x^1, x^2, \dots, x^1 + \delta^1, \dots, x^n) \\ &\vdots \\ \cdot x_n &= (x^1, x^2, \dots, x^1, \dots, x^n + \delta^n) \end{aligned}$$

Les n pas δ^1 doivent être choisis "au mieux" : en fait, il n'existe pas de critère bien établi pouvant guider le choix de l'utilisateur, surtout si ce dernier n'a aucune information à priori sur la fonction considérée.

Cependant il doit, dans la mesure du possible, choisir chaque pas "grand", par exemple de l'ordre de la moitié du domaine de la variable correspondante, où il pense que le minimum se trouve.

De toutes façons, si les pas sont trop grands, la procédure commence par une ou plusieurs contractions, ce qui, tout compte fait, retarde moins le simplexe qu'un piétinement dû à une base par trop étriquée.

Par contre, dans le cas d'une fonction présentant plusieurs minimums, prendre un trop grand pas fait courir le risque de changer de cuvette.

C - Régénération

Partant d'une base non dégénérée, la procédure ne peut donner, au moins du point de vue mathématique, qu'une base non dégénérée.

En fait, lorsque le simplexe se trouve sur un glacis, c'est-à-dire un paysage n'offrant pas de difficultés, il a tendance à s'allonger dans la direction qu'il a prise. Si cette circonstance se poursuit pendant un certain nombre d'itérations, la base devient pseudo-dégénérée, et peut, par le jeu des erreurs de chute, devenir complètement dégénérée : le simplexe est alors incapable de changer de direction, et est arrêté par la première difficulté.

Nous avons été ainsi amenés à prévoir une procédure de régénération du simplexe.

Cette procédure est enclenchée lorsqu'il y a eu 4 contractions successives non suivies de succès : nous avons pu constater, lors des essais effectués, que les contractions suivantes n'apportaient jamais d'amélioration.

La régénération est une reconstruction de la base, à partir du point x_m^* (correspondant au minimum atteint), avec des pas proportionnels aux pas de départ : le coefficient de réduction étant égal à $\frac{1}{\text{Log } \frac{M}{n}}$ où M est le nombre de fois que la fonction à minimiser a été calculée depuis le début de la minimisation.

Ce coefficient est toujours inférieur à 1, et tend lentement vers 0 au fur et à mesure que M croît. Quoiqu'entièrement empirique, ce coefficient nous a donné satisfaction lors des divers tests de l'algorithme.

D - Choix des coefficients

Il reste, pour définir complètement l'algorithme, à choisir α_e , α_r et α_c les meilleurs possibles.

Nedler et Mead ont déterminé expérimentalement ces valeurs en essayant diverses combinaisons $(\alpha_e, \alpha_r, \alpha_c)$ sur trois fonctions, s'annulant toutes les trois au minimum.

1) Fonction de Rosenbrock (1960)

$$f(x^*) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2, \\ \text{départ } (-1, 2; 1) .$$

2) Fonction de Powell (1962)

$$f(x^*) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4, \\ \text{départ } (3; -1; 0; 1) .$$

3) Fonction de Fletcher et Powell (1963)

$$f(x^*) = 100 \left\{ \left[x_3 - 10 \theta \right]^2 + \left[\sqrt{x_1^2 + x_2^2} - 1 \right]^2 \right\} + x_3^2, ,$$

$$\text{où } 2\pi \theta = \arctg \left(\frac{x_2}{x_1} \right) \quad \text{si } x_1 > 0$$

$$2\pi \theta = \pi + \arctg \left(\frac{x_2}{x_1} \right) \quad \text{si } x_1 < 0$$

$$\text{départ } (-1; 0; 0) .$$

Nous avons repris le problème en minimisant, par la méthode du simplexe elle-même, une "fonction de coût", construite de la façon suivante : on se donne une fonction à minimiser, et les conditions dans lesquelles doit s'opérer la minimisation : point de départ, pas, précision désirée au minimum.

A chaque triplet $(\alpha_e, \alpha_r, \alpha_c)$, la fonction de coût fait alors correspondre un nombre, qui est égal au nombre d'appels qu'a nécessité la minimisation de la fonction par un simplexe dont la stratégie est représentée par ce triplet.

La minimisation de la fonction de coût par rapport à ces trois variables fournit, pour la fonction considérée et dans les conditions choisies, la

meilleure stratégie ($\alpha_e, \alpha_r, \alpha_c$).

Cette stratégie dépend beaucoup de la fonction et des conditions choisies : cependant, pour des conditions voisines de celles où nous nous trouverons placés par la suite, la stratégie optimale diffère peu de celle adoptée par Nelder et Mead : $\alpha_e = -1$; $\alpha_r = -2$; $\alpha_c = \frac{1}{2}$.

Ces valeurs correspondent respectivement :

- à la symétrie de x_s^* par rapport à $\bar{x}^*$ pour la réflexion
- à la symétrie de $\bar{x}^*$ par rapport à $x^* *$ pour l'expansion
- au milieu de $(x_s^*, \bar{x}^*)$ pour la contraction.

Ce sont ces valeurs que nous adopterons par la suite.

III - RESULTATS

Nous avons essayé cet algorithme sur diverses fonctions (Programme SPSRM 351) :

@ . Tout d'abord les trois fonctions précédemment citées : elles ne présentent aucune difficulté particulière pour le simplexe. Celui-ci trouve toujours la solution, plus ou moins rapidement selon le point de départ et surtout les pas initiaux.

Pour de telles fonctions, dont le nombre de variables est assez faible (2 à 4), la méthode s'avère d'une efficacité très comparable aux autres méthodes, utilisant les dérivées, et même bien souvent supérieure : nous rejoignons en cela les conclusions de l'étude systématique entreprise récemment par

M.J. Box (1966) sur huit méthodes générales de minimisation.

⑨ . Nous avons voulu essayer par ailleurs la méthode du simplexe sur une fonction dont les dérivées présentent une discontinuité, fonction qui met en échec la plupart des autres méthodes : nous avons donc construit une fonction à deux variables, qui s'écrit :

$$f(x^*) = \left| x_2 - a |x_1 - 1| + a \right| + |x_1| \quad , \quad \text{point de départ } (4., 0.)$$

où a est un paramètre que l'on peut faire varier d'un cas à l'autre.

Cette fonction se présente sous la forme de deux vallées en V , qui se coupent elles-mêmes suivant un angle d'autant plus aigu que le paramètre a est plus grand.

Son minimum est égal à 0 ; il est atteint pour $x_1 = x_2 = 0$; il est situé à l'intersection de 4 plans (les lignes de niveaux de cette fonction sont représentées fig. 3 , pour $a = 2$).

L'algorithme du simplexe trouve la solution tant que a est inférieur à 12. Or si nous nous plaçons en un point P , situé au fond de l'une des vallées de la fonction, l'angle utile δ , c'est-à-dire l'angle (défini par rapport à la base du simplexe dans une représentation orthonormée) dans lequel se trouvent les points d'altitude inférieure à celle de P , est égal à :

$$\delta = \arctg \frac{2}{a} .$$

Pour $a = 12$, cet angle est donc inférieur à 0,792 degré, soit moins de 48'.

Nous avons essayé d'autres fonctions présentant des discontinuités, ou des

points anguleux, comme par exemple la fonction :

$$f(x_1, x_2) = 2 \left(\left[\left| 2 x_2 - \left| \sin \frac{10\pi}{10|x_1|+1} \right| \right| - 1 \right]^3 + 1 \right) + |x| .$$

Pour cette fonction également, nous avons pu constater que le simplexe était mis en échec dès que l'angle utile δ était de l'ordre du $1/2$ degré.

En pratique, cependant, les fonctions que nous avons à minimiser ne présentent pas de telles difficultés.

CHAPITRE IV

ESTIMATION DE LA MATRICE DE COVARIANCE

Les estimations des inconnues étant ainsi obtenues par la minimisation de la fonction de coût, il est intéressant d'une part de se demander quelle est l'erreur probable sur les estimations, et de calculer les éventuelles corrélations entre les inconnues, d'autre part de définir et d'estimer des coefficients de qualité, permettant de juger, de façon objective, la qualité de la description du phénomène physique.

I - EXPRESSION DE LA MATRICE DE COVARIANCE

Nous allons donc calculer la matrice E de covariance des estimations.

Cette matrice vaut :

$$E = \overline{z \cdot z} - \overline{z} \cdot \overline{z}$$

On sait (Tournarie, 1964 b) que dans le cas linéaire, cette matrice est calculée par diverses expressions, dont l'une des plus pratiques est :

$$E = \left[I + X\tilde{X} \tilde{A}W \right]^{-1} X\tilde{X}$$

avec :

- A : matrice de l'application linéaire
- W : matrice des poids des observations
- $X\tilde{X}$: matrice de covariance a priori des inconnues.

Pour calculer cette expression dans le cas non linéaire, il nous faut estimer la matrice A , les deux autres matrices W et $\tilde{X}\tilde{X}$ étant déjà à notre disposition.

II - ESTIMATION DE LA MATRICE A

Nous allons développer l'opérateur $\mathcal{A}$ en série de Taylor au voisinage du minimum x_0 de ε , et n'en retenir que la partie linéaire : on a en effet, en négligeant les termes de degré supérieur ou égal à 2 :

$$\mathcal{A}(x^*) - \mathcal{A}(x_0) = \left[x^* - x_0 \right] \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial x^*}(x_0).$$

Il nous est donc nécessaire de connaître les $n_x \times n_y$ dérivées de la loi théorique $f(t_i^*, x^*)$ par rapport à x^* , c'est-à-dire les $n_x \times n_y$ valeurs :

$$\frac{\partial f(t_i^*, x^*)}{\partial x_j} \quad \left\{ \begin{array}{l} i \in [1, n_y] \\ j \in [1, n_x] \end{array} \right.$$

Il semble qu'ainsi nous nous heurtions de nouveau au problème du calcul des dérivées de la loi théorique, problème que nous avons évité lors de la minimisation de la fonction de coût.

En fait, les conditions sont maintenant totalement différentes : en effet, nous nous trouvons au minimum de la fonction de coût, et il est facile de voir qu'au voisinage de ce minimum, si les informations expérimentales forment la partie la plus importante de l'information totale, la fonction ε est assimilable à un hyperparaboloïde.

Sinon, le calcul sera peut-être faux, mais de toutes façons il n'a plus d'intérêt puisque l'on sait qu'il doit restituer les informations a priori.

Nous allons donc utiliser cette propriété pour estimer les dérivées.

Remarquons d'abord que la fonction de coût ε est égale à la somme de $n_x + n_y$ variables aléatoires liées par n_x relations : il y a n_y degrés de liberté. Or nous savons qu'au minimum ε_0 de ε , ces variables doivent suivre, si les incertitudes ont été bien estimées en moyenne, une loi normale réduite.

ε_0 suit dans ces conditions, une loi du χ^2 à n_y degrés de liberté : par conséquent, toujours dans l'hypothèse où les erreurs ont été bien estimées, l'espérance mathématique de ε_0 est égale à n_y . En fait, dans la plupart des cas, le coefficient $k = \frac{\varepsilon}{n_y}$ est différent de 1, traduisant le fait que les erreurs estimées ont été multipliées par un coefficient k' par rapport aux erreurs réelles. Ces deux coefficients k et k' sont d'ailleurs approximativement égaux tant qu'ils ne sont pas trop différents de 1.

Or, pour estimer les dérivées, nous cherchons, pour chacune des composantes du vecteur des estimations z_0^* , un accroissement dz_1 correspondant, pour ε , à une perte de probabilité donnée.

Pour coïncider avec le système linéaire, nous chercherons l'accroissement dz_1 tel que la fonction de coût soit augmentée de la même quantité dont il se-rait augmenté pour un accroissement d'un écart-type dans un système linéaire ; nous cherchons donc dz_1 tel que :

$$\begin{aligned} \varepsilon(z_0^* + u_1^* dz_1) &= n_y + 1 & \text{si } \varepsilon(z_0^*) &= n_y \\ \text{soit } \varepsilon(z_0^* + u_1^* dz_1) &= \left[1 + \frac{1}{n_y}\right] \varepsilon_0 & \text{si } \varepsilon(z_0^*) &= \varepsilon_0 \neq n_y. \end{aligned}$$

Pour estimer rapidement les accroissements dz_i sur chacune des inconnues, nous utiliserons le fait que $\varepsilon(z^*)$ doit être, aux environs du minimum, assimilable à un paraboloïde.

D'autre part, la valeur $[1 + \frac{1}{n_y}] \varepsilon_0$ n'étant pas critique, nous rechercherons en pratique (pour des raisons ^y d'économie de temps), l'accroissement dz_i tel que :

$$\frac{\sqrt{2}}{2} [1 + \frac{1}{n_y}] \varepsilon_0 < \varepsilon (z_0^* + u_1^* dz_i) < \sqrt{2} [1 + \frac{1}{n_y}] \varepsilon_0 .$$

Nous sommes maintenant en mesure d'estimer les coefficients de la matrice A par l'expression :

$$A_{ji} = \frac{f(t_j^*, z_0^* + u_1^* dz_i) - f(t_j^*, z_0^*)}{dz_i} .$$

L'inversion de la matrice $[I + \tilde{XX} AWA]$ de dimensions $n_x \times n_x$ est réalisée par le sous-programme bibliothèque "INVM" utilisant le principe du pivot maximum.

L'écart statistique sur la $i^{\text{ème}}$ inconnue est alors égal à :

$$\sigma_i = \sqrt{E_{ii}} ,$$

tandis que le coefficient de corrélation entre la $i^{\text{ème}}$ et la $k^{\text{ème}}$ inconnue est égal à :

$$\rho_{ik} = \frac{E_{ik}}{\sqrt{E_{ii}} \sqrt{E_{kk}}} .$$

III - ESTIMATEURS DE QUALITE

Lorsque les composantes de l'opérateur $\mathcal{A}$ peuvent être rangées sous la forme d'une fonction dépendant continûment et uniquement d'un indice continu, certaines propriétés statistiques entre points voisins peuvent être exploitées pour définir un coefficient, qui constitue un estimateur de la qualité de la description du phénomène physique.

Nous supposons toujours que les erreurs statistiques sur les observations sont sans corrélations entre elles : si nous observons des corrélations entre les écarts ε_i des observations y_i aux valeurs y_i calculées avec les estimations fournies par le programme, ces corrélations doivent être attribuées à l'impossibilité, pour l'équation utilisée, de décrire convenablement l'espérance mathématique réelle des observations.

L'écart ε_i peut être considéré comme la somme de deux termes :

$\varepsilon_i = \delta_i + \varphi_i$ (dans l'hypothèse où il n'y a pas de corrélations entre l'erreur sur la $j^{\text{ème}}$ observation et l'erreur sur la $i^{\text{ème}}$ inconnue)

δ_i est la part due à la distorsion

φ_i est la part due à la fluctuation.

Par définition, la fluctuation quadratique relative moyenne est égale à :

$$\overline{\varphi} = \frac{1}{n_y} \sum_{i=1}^{n_y} \frac{\varphi_i^2}{\sigma_i^2},$$

la distorsion quadratique relative moyenne :

$$\overline{\delta} = \frac{1}{n_y} \sum_{i=1}^{n_y} \frac{\delta_i^2}{\sigma_i^2},$$

et l'erreur quadratique relative moyenne

$$\overline{\varepsilon} = \frac{1}{n_y} \sum_{i=1}^{n_y} \frac{\varepsilon_i^2}{\sigma_i^2} ,$$

soit, en faisant toujours l'hypothèse qu'il n'y a pas de corrélations entre δ_i et φ_i :

$$\overline{\varepsilon} = \overline{\varphi} + \overline{\delta} .$$

D'autre part

$$\varepsilon_i \varepsilon_j = \delta_i \delta_j + \delta_i \varphi_j + \delta_j \varphi_i + \varphi_i \varphi_j .$$

Donc, compte tenu des hypothèses faites :

$$\sum_{i=1}^{n_y-1} \frac{\varepsilon_i \varepsilon_{i+1}}{\sigma_i \sigma_{i+1}} = \sum_{i=1}^{n_y-1} \frac{\delta_i \delta_{i+1}}{\sigma_i \sigma_{i+1}} .$$

Nous admettons en outre que :

$$\sigma_i \simeq \sigma_{i+1}$$

$$\text{et} \quad \overline{\delta_i \delta_{i+1}} \simeq \overline{\delta_i^2} ,$$

ce qui correspond à une évolution lente de l'erreur systématique en fonction de i , et nous permet d'écrire :

$$\overline{\delta} = \frac{1}{n_y-1} \sum_{i=1}^{n_y-1} \frac{\varepsilon_i \varepsilon_{i+1}}{\sigma_i \sigma_{i+1}} \geq 0 .$$

Posons $\rho = \frac{\overline{\delta}}{\overline{\varepsilon}}$: nous pouvons écrire :

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^{n_y-1} \frac{\varepsilon_1}{\sigma_1^2} \frac{\varepsilon_{i+1}}{\sigma_{i+1}^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_y-1} \frac{\varepsilon_1^2}{\sigma_1^2} \sum_{i=2}^{n_y-2} \frac{\varepsilon_{i+1}^2}{\sigma_{i+1}^2}}} \geq 0 .$$

Comme $\overline{\varphi} = [1 - \rho] \overline{\varepsilon}$, nous voyons que la quantité $f = 1 - \rho$, toujours comprise entre 0 et 1, représente la contribution de la fluctuation $\overline{\varphi}$ à l'erreur moyenne $\overline{\varepsilon}$.

Plus f est proche de 1, plus les écarts observés entre y_1 et y_1 sont indépendants en moyenne, et meilleure est la qualité de la description du phénomène physique par l'équation proposée.

Si, au contraire, f est proche de 0, la part de la distorsion $\overline{\delta}$ à l'erreur moyenne $\overline{\varepsilon}$ devient prépondérante, ce qui veut dire que les y_1 décrivent mal les y_1 , et les estimations des inconnues peuvent alors être biaisées.

Nous sommes également en mesure d'estimer le rapport k , défini comme le quotient de l'erreur statistique moyenne réellement faite sur les observations, par l'erreur statistique moyenne supposée par l'utilisateur.

En effet, nous avons une estimation de la contribution de la fluctuation à l'erreur totale f ; nous connaissons également une estimation de l'erreur quadratique moyenne réelle :

$$\overline{\varepsilon} = \sum_{i=1}^{n_y} \frac{\varepsilon_1^2}{\sigma_1^2} .$$

D'autre part, nous savons que si les incertitudes expérimentales avaient été bien estimées, l'espérance mathématique de cette erreur quadratique moyenne aurait été égale à n_y .

On a donc :

$$\sqrt{\frac{f}{n_y} \sum_{i=1}^{n_y} \frac{\varepsilon_i^2}{\sigma_i^2}} .$$

Comme nous l'avons déjà remarqué, ce calcul n'est valable que lorsque k est assez voisin de 1. Sinon, il ne peut que fournir une indication sur le sens de l'erreur commise dans l'estimation des incertitudes.

CHAPITRE V

RESULTATS

Nous avons construit, d'après les principes précédents, un programme destiné à faire exécuter les calculs sur ordinateur, qui existe en deux versions:

- 1) - FORTRAN II Version 3 et FAP
- 2) - FORTRAN IV

testées et utilisées sur les ordinateurs 7094 II du Service de Calcul Electronique du Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay.

Ce programme, nommé "SPSRM 360", a été écrit de façon à pouvoir d'une part traiter le maximum de problèmes différents sans modifications, et d'autre part être facilement modifiable en cas de besoin.

La plupart des problèmes ne diffèrent que par la forme de la loi de la dépendance théorique inconnues-observations : cette loi doit être fournie au programme sous la forme d'une fonction FORTRAN répondant aux spécifications précisées dans l'annexe A.

Dans un souci de facilité d'emploi, nous avons utilisé pour l'entrée des données, non pas les "FORMAT" classiques du FORTRAN, mais une formule fondée sur l'utilisation d'identificateurs alpha-numérique. On trouvera en annexe B les spécifications du programme concernant les données.

Un certain nombre de fonctions, correspondant à des problèmes classiques, ont été écrites et testées : l'annexe C présente la liste et les principales caractéristiques des fonctions les plus courantes.

Nous nous attacherons maintenant à quelques-unes d'entre elles, qui nous ont permis :

- soit d'effectuer des contrôles, tant sur le fonctionnement du programme que sur la validité des formules employées et des approximations réalisées.
- soit de justifier, sur des cas réels, certaines des hypothèses faites.

I - SIMULATION D'EXPERIENCE

Le moyen le plus sûr de vérifier nos calculs nous a paru être la résolution, par la méthode exposée, d'un système d'observations simulées.

Pour cela, nous sommes partis d'un problème concret et courant : étant donné n_y angles θ_i de réflexion d'un cristal quadratique et les n_y triplets (h_i, k_i, ℓ_i) des indices correspondants, estimer au mieux les paramètres a et c du cristal, ainsi que l'excentricité ε de l'échantillon.

La loi théorique liant ces diverses valeurs s'écrit par exemple :

$$\left(h_i^2 + k_i^2 \right) \frac{\lambda^2}{2a^2} + \ell_i^2 \frac{\lambda^2}{2c^2} + \varepsilon \sin^2 2\theta_i = 1 - \cos 2\theta_i \quad (1)$$

pour $i = 1, n_y$,

λ étant la longueur d'onde de la radiation utilisée.

Remarquons au passage que cette loi est linéaire par rapport aux variables $\frac{1}{a^2}$, $\frac{1}{c^2}$ et ε .

Normalement, les angles θ_i sont fournis par l'expérience, avec une certaine incertitude $d\theta_i$.

Nous sommes, au contraire, partis de paramètres a priori :

$$\begin{aligned} a &= 3.2517 \text{ \AA} \\ c &= 4.9459 \text{ \AA} \end{aligned}$$

(qui sont les paramètres fournis par le fichier de l'ASTM pour l'indium à 26°C) et nous avons calculé les angles $\tilde{\theta}_1$ pour 19 triplets (h_1, k_1, l_1) également fournis par le fichier, en nous donnant arbitrairement :

$$\varepsilon = 0.12 \quad (\text{en \% du rayon de la chambre})$$

et en prenant :

$$\lambda = 1,5405 \text{ \AA}.$$

Nous avons ajouté aux angles ainsi calculés, une variable aléatoire suivant une loi de Laplace-Gauss d'écart-type $d\theta$. Cette variable est fournie par une fonction FORTRAN (utilisant un générateur de nombres aléatoires suivant une loi de répartition uniforme entre -1 et +1). Cette fonction est initialisée (c'est-à-dire qu'elle peut fournir des suites de nombres aléatoires soit identiques, soit différentes).

Nous avons fait résoudre par le programme 21 cas, issus de suites différentes, avec $d\theta = 0.05$ degrés, ce qui nous a permis de faire une statistique sur 21 "expériences" différentes, mais portant sur le même "corps", dont nous connaissions parfaitement par ailleurs les caractéristiques.

Les valeurs initiales pour a , c et ε ont également été tirées au hasard de la même façon.

Le tableau I présente, en face des valeurs théoriques de chaque grandeur, la moyenne des valeurs trouvées par le programme, l'écart-type de cet ensemble de valeurs, et la moyenne des écart-types trouvés par le programme.

On voit qu'il y a très bonne concordance, d'une part entre les valeurs théoriques et la moyenne des valeurs estimées, d'autre part entre l'écart-type sur ces valeurs et la moyenne des écart-types estimés.

Signalons à titre indicatif que la résolution d'un cas (lecture des données et impression de résultats inclus) a demandé en moyenne :

5,2 sec. de calculs en FORTRAN II Version 3 sur 7094 II.

TABLEAU I

Inconnues	Valeurs théoriques	Moyenne des valeurs estimées	Ecart-type sur ces valeurs	Moyenne des écart-types estimés
a	3.25170	3.25178	0.00072	0.00071
c	4.94590	4.94589	0.00097	0.00098
ε	0.12000	0.12235	0.02994	0.02462

II - ETUDE DE LA VARIATION DES LARGEURS DE RAIES

Cette étude a pour but d'estimer la susceptibilité magnétique (paramètre γ) à partir des largeurs des spectres diffusés (fonction I3EPFE, Annexe C).

Ce problème présente ceci de particulier que ses données expérimentales (largeurs des raies en fonction de la température) sont elles-mêmes l'un des résultats de l'étude de la distribution angulaire des neutrons lors d'une diffusion critique (approchée par une courbe de Lorentz-Cauchy additionnée à une composante élargie) en fonction de θ , à une température donnée (fonction

D3EFFE, Annexe C).

Nous avons utilisé ici les résultats expérimentaux qui nous ont été aimablement communiqués par Jacrot, Parette et Usha (1966), à la suite d'une étude sur le fluorure de manganèse $Mn F_2$, corps anti-ferromagnétique.

Cette étude portait sur 39 spectres à des températures différentes, et nous a donné l'estimation de 39 largeurs et des 39 écart-types correspondants.

Ce sont ces grandeurs qui ont servi de données pour l'estimation de la susceptibilité magnétique, par un autre programme.

Or le calcul de f et de k a donné respectivement 0,935 et 1,017, ce qui montre la cohérence de la démarche proposée (ainsi d'ailleurs que la validité des lois théoriques employées).

ANNEXE A

SPECIFICATIONS DE LA FONCTION FORTRAN APPELEE PAR LE PROGRAMME "360".

Le programme SPSRM "360" peut estimer, à partir d'une série d'observations, les paramètres $\{x_j\}$ qui interviennent selon une loi connue dans l'espérance mathématique de ces observations.

Pour cela, il suffit d'écrire une fonction FORTRAN, permettant de calculer, à toutes les abscisses expérimentales au moins, la valeur théorique (c'est-à-dire plus précisément l'espérance mathématique) de l'ordonnée correspondant à un ensemble $\{x_j\}$ donné.

Le nom de cette fonction est obligatoirement : EFFE . Elle a 4 arguments : I , X , T , XA .

1^{er} Argument : I

a) Si $I = -1$: phase d'initialisation.

L'appel avec $I = -1$ a lieu après lecture de la carte "CALCUL =" (voir annexe B) et avant tout raffinement. Elle permet par exemple à l'utilisateur d'effectuer certains calculs préalables, qui conduisent souvent à un très gros gain de temps.

Elle permet aussi, lorsque les résultats des expériences sortent directement sur cartes perforées, de lire ces cartes suivant le modèle adéquat, librement choisi par l'utilisateur.

Elle permet même un prétraitement des observations. Toutefois ce prétraitement est à proscrire s'il introduit des corrélations entre les écarts aléatoires des observations.

b) Si $I = 0$: tracé de courbe.

Le programme "360" permet de tracer des courbes avec un certain pas (voir annexe B - chap. III-C). Si ce pas est choisi non nul, la fonction doit être écrite de façon à pouvoir être calculée pour n'importe quelle abscisse. Elle est alors appelée avec $I = 0$ au moment du tracé de la courbe.

c) Si $I = 1, 2, 3, \dots, N_y$: pour ces valeurs de I , la fonction EFFE doit calculer les ordonnées théoriques correspondant aux abscisses expérimentales $(T(1), T(2), \dots, T(N_y))$, N_y étant le nombre total d'observations dans le cas considéré.

2^{ème} Argument : X

C'est un tableau colonne, de dimension au moins égale à N_x , contenant les N_x inconnues à estimer.

3^{ème} Argument : T

C'est un tableau colonne, de dimension au moins égale à N_y ,

Si $I = 0$, l'abscisse pour laquelle l'ordonnée doit être calculée est contenue par $T(1)$.

Si $I > 0$, l'ordonnée à calculer correspond au $I^{\text{ème}}$ point expérimental. T contient alors les N_y abscisses correspondant aux points expérimentaux.

4^{ème} Argument : XA

C'est un tableau, de dimensions 500×3 dans le programme standard, qui peut être utilisé pour indiquer à la fonction EFFE certaines constantes, fournies grâce à la donnée : $XA(i, j) = x$ (voir annexe B, chap. I-B).

SUJETIONS

La version stantard du programme "360" , écrite en vue de traiter le maximum de problèmes distincts sans être modifiée, présente un certain nombre de sujétions, dont la plupart ne sont pas fondamentales.

A - Commun

- . Première mémoire libre : 4206_{10}
- . L'accès au "COMMUN" permet à l'utilisateur de modifier certaines quantités, en particulier dans la phase d'initialisation de la fonction.

Le tableau de la page suivante donne les différents emplacements.

- . Si la fonction EFFE doit être écrite en utilisant le commun à d'autres fins, consulter les auteurs qui fourniront une version du programme n'utilisant pas le commun.

B - Nombre maximum d'inconnues 10

C - Nombre maximum d'observations 1000

Ces deux nombres peuvent être modifiés, soit en plus, soit en moins (dans le cas d'une fonction EFFE particulièrement encombrante, par exemple) : consulter les auteurs.

D - Encombrement maximum

La version stantard du programme "360" laisse environ $12\ 700_{10}$ mémoires disponibles pour la fonction EFFE.

Structure du Commun

N° de la Mémoire dans le Commun	Adresse Octale Absolue	Nature	Genre	Nom symbolique
1	77 462	Nombre d'inconnues (≤ 10)	Fixe	NX
3	77 460	Temps maximal (en tierces)	Fixe	
4	77 457	Nombre d'observations (≤ 1000)	Fixe	NY
5	77 456	Inconnues	Flot.	Z
15	77 444	Estimations initiales des inconnues	Flot.	XC
25	77 432	Incertitudes initiales des inconnues	Flot.	DX
35	77 420	Bornes inférieures	Flot.	XI
45	77 406	Bornes supérieures	Flot.	XS
55	77 374	Bloc de travail (ne pas utiliser)	Flot.	E
206	77 145	Ordonnées des observations	Flot.	Y
1206	75 175	Incertitude sur les ordonnées	Flot.	DY
2206	73 225	Abscisses des observations	Flot.	T
3206	71 255	Incertitude sur les abscisses	Flot.	DT
4206	67 305	Première mémoire libre du commun	Flot.	

ANNEXE B

SPECIFICATIONS DU PROGRAMME "360"

Ce programme peut traiter une suite indéfinie de cas ; chaque cas est défini par un ensemble de cartes fournissant les données correspondantes à ce cas.

Une "donnée" est constituée par un signe spécial, suivi d'un identificateur, suivi d'un spécificateur constitué d'une liste d'indices (éventuellement) suivi du caractère "=", suivi éventuellement d'une liste de nombres :

Exemples :

1) PRECISION	=	1 . E - 20
2) XA (31,2)	=	3.235 (Longueur d'onde)
3) AVEC DESSIN	=	
4) No	=	12 , 1.28 , 12.48 , 2.-3
5) Y (28)	=	- 3.465 + 8

Un "identificateur" est une suite de lettres ou de chiffres, commençant obligatoirement par une lettre. Exemples : PRECISION, XA, No, etc... .

Une "liste d'indices" est constituée par le caractère "(", suivi d'un nombre fixe sans signe qui est le 1er indice, suivi éventuellement d'une virgule et d'un 2ème indice, suivi éventuellement d'un commentaire de longueur quelconque, commençant par une lettre et ne comportant ni caractère "=", ni caractère "(", suivi enfin du caractère ")" .

S'il s'agit d'une donnée sans indice (ou, ce qui revient au même, d'indice nul), cette liste d'indices peut être entièrement omise.

Exemples : 2) : (31,2)
 5) : (28)
 3) : pas de liste d'indices

Une liste de nombres est constituée soit d'un nombre seul, soit de plusieurs nombres séparés par des virgules.

Un "nombre" est une suite de chiffres pouvant être précédée d'un signe. En l'absence de signe, le nombre est considéré comme positif.

Dans la suite de chiffres peut s'intercaler un point "." . S'il n'y a pas de point, le nombre est dit nombre "fixe." . Sinon il est dit nombre "flottant" , il peut alors être affecté d'un exposant, qui est un nombre fixe, de valeur absolue inférieure à 38 , précédé soit d'un signe, soit de la lettre E seule (l'exposant est alors considéré comme positif), soit des deux.

Exemples :

Nombres fixes	Nombres flottants
12	1.238
+3	- 1.2+2 équivalent à - 120 .
-104	- 0.26E3 équivalent à - 260 .
	0.25-4 équivalent à 2.5×10^{-5}
max+128000	10.01E+1 équivalent à 100.1
	- 2.28E-1 équivalent à -0.228

L'ordre dans lequel sont fournies les différentes données est absolument quelconque.

Chaque carte peut porter un nombre quelconque de données, séparées par des virgules, mais une colonne, au moins, de la carte, doit rester blanche.

Entre chaque donnée, on peut intercaler un nombre quelconque de commentaires, pour lesquels on peut utiliser n'importe quels caractères, sauf le caractère "=".

Une carte peut ne porter qu'un commentaire, ou même être vierge ; ceci permet d'aérer l'impression des données, qui sont reproduites avant tout calcul telles quelles ont été fournies.

Les données peuvent être classées en trois groupes, selon qu'elles concernent les données préalables, les observations, ou les directives imposées au programme.

I - DONNEES PREALABLES

A - Concernant les inconnues

Quatre nombres, représentant les informations à priori, doivent être donnés pour la $j^{\text{ème}}$ inconnue.

<u>Identificateur</u>	<u>Indice</u>	<u>Egale</u>	<u>Nombre</u>	<u>Nature</u>	} de la $j^{\text{ème}}$ inconnue
XC	(j)	=	flottant	Valeur la plus probable	
DX	(j)	=	flottant	Ecart statistique	
XI	(j)	=	flottant	Borne inférieure	
XS	(j)	=	flottant	Borne supérieure	

Les bornes inférieure et supérieure représentent les valeurs en dehors desquelles l'inconnue correspondante n'a plus de signification physique.

Exemple : 0. et 1. pour une concentration.

Une dernière donnée précise le nombre total d'inconnues du cas considéré :

<u>Identificateur</u>	<u>Indice</u>	<u>Egale</u>	<u>Nombre</u>	<u>Nature</u>
NOMBRE D'INCONNUES	absent	=	fixe	

B - Concernant les Variables auxiliaires

Les fonctions EFPE peuvent être amenées à utiliser des valeurs, qui, constantes dans un cas donné, sont susceptibles de varier d'un cas à l'autre (par exemple, la longueur d'onde et les indices des raies dans la recherche des paramètres d'un cristal).

Ces valeurs peuvent être fournies grâce à la donnée :

XA	(i,j)	=	flottant ou fixe
----	-------	---	---------------------

II - DONNEES CONCERNANT LES OBSERVATIONS

Pour chacune des n_y observations devant être prises en compte, on doit fournir son abscisse t , son ordonnée y et l'incertitude sur cette ordonnée dy .

Ces nombres peuvent être donnés soit isolément, soit en séquence, soit globalement.

A - Isolement

A chacun de ces nombres, correspond un identificateur.

<u>Identificateur</u>	<u>Indice</u>	<u>Egale</u>	<u>Nombre</u>	<u>Nature</u>	
T	(1)	=	flottant	abscisse	} de la 1 ^{ème} observation
Y	(1)	=	flottant	ordonnée	
DY	(1)	=	flottant	incertitude	

B - En séquence

Les identificateurs précédents peuvent être utilisés pour fournir les nombres en séquence, à partir de l'indice 1, séparés par un caractère spécial.

Exemple : on a $dy_4 = 1.$, $dy_5 = 1.$, etc... $dy_{10} = 1.$

On peut écrire :

DY (4) = 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.

Cette liste peut se poursuivre sur plusieurs cartes (à partir du 2^{ème} nombre), mais cette possibilité n'est pas conseillée, les cartes n'étant alors plus interchangeables.

C - Globalement

Les trois nombres correspondants à la 1^{ème} observation peuvent être fournis globalement grâce à la donnée :

No	absent	=	fixe,	1 ,
			flot.,	t ,
			flot.,	y ,
			flot.,	dy,

Exemple : La 123^{ème} observation ayant été faite à l'abscisse $t = 28.46$, donnant une ordonnée de $y = 1.46 \text{ E} + 8$ et une incertitude $dy = 1.25 \text{ E} + 4$ la

donnée sera :

$$N^0 = 123 , 28.46 , 1.46 E + 8 , 1.25 E + 4$$

Le nombre total d'observations n_y est le plus grand indice "i" rencontré dans la lecture du cas considéré, s'il y a lieu.

Sinon, il est égal au nombre d'observations du cas précédent.

Enfin, si l'on désire l'imposer à une valeur autre, on peut utiliser la donnée :

<u>Identificateur</u>	<u>Indice</u>	<u>Egale</u>	<u>Nombre</u>	<u>Nature</u>
NOMBRE D'OBSERVATIONS	absent	=	fixe	Nombre total d'observations à prendre en compte dans le cas considéré.

III - DONNEES CONCERNANT LES DIRECTIVES

Les directives peuvent être classées selon leur fonction.

A - Directives contrôlant le raffinement

PRECISION	absent	=	flot.	Est en pratique de l'ordre de $1.E-8$
TEMPS MAXIMAL	absent	=	fixe	permet d'imposer au programme un temps maximal de raffinement, temps exprimé en 1/60 ème de seconde. Cette donnée est annulée par la suivante.

<u>Identificateur</u>	<u>Indice</u>	<u>Egale</u>	<u>Nombre</u>	<u>Nature</u>
TEMPS ILLIMITE	absent	=	ignoré	Si dans un cas, la durée du raffinement a été limitée par la donnée précédente, elle le sera dans tous les cas suivants. Cette donnée permet de libérer le programme de la contrainte "temps".

B - Directives contrôlant l'impression

SANS IMPRESSION	absent	=	ignoré	Cette directive permet de supprimer la majeure partie des impressions durant le raffinement, ce qui diminue le nombre de lignes imprimées, mais ne permet plus de suivre l'évolution du raffinement.
AVEC TABLEAU	absent	=	ignoré	Cette directive provoque l'impression d'un tableau donnant sur la même ligne, le n° de l'observation, son abscisse, son ordonnée, l'incertitude de cette ordonnée, l'écart entre l'ordonnée observée et l'ordonnée calculée, enfin l'ordonnée calculée.

Le programme imprime ensuite l'estimation de la contribution de la fluctuation à l'erreur totale, ainsi que le rapport de l'erreur statistique effective à l'erreur statistique supposée.

C - Directives contrôlant les tracés de courbe

Ces directives permettent d'obtenir, d'une part l'impression de courbes imprimées en même temps que les résultats, d'autre part des cartes perforées qui, reprises par un autre programme, permettent le tracé automatique sur papier millimétré, grâce au traceur "Calcomp".

Les données correspondantes sont les suivantes :

<u>Identificateur</u>	<u>Indice</u>	<u>Egale</u>	<u>Nombre</u>	<u>Nature</u>
URBE DES HYPOTHESES	absent	=	ignoré	Cette directive provoque l'impression, avant tout raffinement, d'un graphique présentant d'une part la courbe des observations (le point t_1, y_1 étant représenté par la lettre "O", encadrée par deux caractères "*", qui, pour la même abscisse, représentent y_1+2dy_1 et y_1-2dy_1), d'autre part la courbe théorique (représentée par des caractères "+"), et dont les ordonnées sont calculées à partir des valeurs initiales des inconnues (XC(j)).
AVEC TRACE	absent	=	ignoré	Cette directive a le même effet que la précédente, mais la courbe théorique est calculée d'après les valeurs des inconnues trouvées par le raffinement.

<u>Identificateur</u>	<u>Indice</u>	<u>Egale</u>	<u>Nombre</u>	<u>Nature</u>
AVEC DESSIN	absent	=	ignoré	Cette directive a le même effet que la précédente avec en sus, perforation des cartes en vue du tracé par "Calcomp".

Pour ces trois courbes, le programme choisit automatiquement un cadre tel que toutes les observations puissent figurer dans la représentation.

Toutefois, l'utilisateur a la possibilité d'imposer ce cadre, soit pour les abscisses, soit pour les ordonnées, soit pour les deux, en indiquant au programme les deux valeurs extrêmes correspondantes, grâce aux données :

ABSCISSE A GAUCHE	absent	=	flot.
ABSCISSE A DROITE	absent	=	flot.
ORDONNEE EN BAS	absent	=	flot.
ORDONNEE EN HAUT	absent	=	flot.

Ce cadre sera alors imposé à toutes les courbes demandées dans le cas considéré.

On peut enfin imposer le même cadre qu'au cas précédent, grâce à la donnée :

MEME CADRE	absent	=	ignoré
------------	--------	---	--------

Pour tracer ces courbes, les points correspondants à la courbe théorique sont calculés pour des abscisses variant pas à pas.

Ce pas peut être choisi soit automatiquement par le programme (il est alors égal au $1/200$ de l'intervalle de variation des abscisses), soit par l'utilisateur, grâce à la donnée :

<u>Identificateur</u>	<u>Indice</u>	<u>Egale</u>	<u>Nombre</u>	<u>Nature</u>
PAS PROPOSE	absent	=	flot.	Si ce nombre est positif, il est pris effectivement comme pas. S'il est négatif, il est interprété comme étant le nombre de points désirés dans l'intervalle de variation des abscisses. Enfin, s'il est nul, seuls seront utilisés les points expérimentaux : ceci permet de travailler avec des fonctions théoriques qui ne sont définies qu'aux points expérimentaux.

Le tracé sur "Calcomp" exige de plus l'indication des dimensions physiques du graphique (cf. rapport SCE n° 214). Le programme prend automatiquement comme dimensions :

39 cm sur l'axe des abscisses
25 cm sur l'axe des ordonnées

ce qui correspond à un format hors-tout d'à peu près 42×27 cm.

Ces dimensions peuvent être modifiées par les données :

LONGUEUR	absent	=	flot.	Nombre de centimètres sur l'axe des abscisses.
----------	--------	---	-------	--

<u>Identificateur</u>	<u>Indice</u>	<u>Egale</u>	<u>Nombre</u>	<u>Nature</u>
HAUTEUR	absent	=	flot.	Nombre de centimètres sur l'axe des ordonnées.

Enfin, une quatrième courbe peut être demandée grâce à la donnée :

COURBE DES ECARTS	absent	=	ignoré	Cette directive provoque l'impression de la courbe des écarts $y_i - y_{i,cal}$ où $y_{i,cal}$ est l'ordonnée calculée pour $t = t_i$, grâce aux inconnues estimées par le programme (le point $[t_i, y_i - y_{i,cal}]$ est représenté par le caractère "O", tandis que le point $[t_i, 0.]$ est représenté par le caractère "+"). On ne peut choisir, pour cette courbe, ni le cadre, ni, évidemment, le pas.
-------------------	--------	---	--------	---

D - Directives contrôlant le déroulement du programme

CALCUL	absent	=	ignoré	Se place après toutes les données concernant un même cas. Le programme abandonne alors la lecture et commence les calculs.
FIN DES DONNEES	absent	=	ignoré	Se place éventuellement après la donnée "Calcul =" du dernier cas à passer et permet d'ignorer toutes les cartes suivantes.

E - Tableau récapitulatif des conditions de matière ou d'annulation

Un certain nombre de directives sont annulées automatiquement d'un cas à l'autre, d'autres peuvent l'être, en bloc, sur demande, grâce à une directive spéciale, d'autres enfin peuvent être modifiées isolément à l'aide de la directive elle-même.

Les différents cas possibles sont regroupés dans le tableau ci-après, où la 1ère colonne énumère les différentes directives et la 1ère ligne les différents événements pouvant les modifier : passage d'un cas à l'autre, directive "NOUVELLES DIRECTIVES"= , directive "TEMPS ILLIMITE" , nouvelle valeur redéfinie par la directive elle-même.

Les directives ci-dessous	sont modifiées ou annulées par			
	Le passage d'un cas à l'autre	la directi- ve "NOUVELLES DIRECTIVES"	la directi- ve "TEMPS ILLIMITE"	la même di- rective défi- nissant une nouvelle va- leur
SANS IMPRESSION		x		
AVEC TABLEAU		x		
COURBE DES HYPOTHESES		x		
AVEC TRACE		x		
COURBE DES ECARTS		x		
AVEC DESSIN	x			
MEME CADRE	x			
ABSCISSE A GAUCHE				x
ABSCISSE A DROITE				x
ORDONNEE EN BAS				x
ORDONNEE EN HAUT				x
PAS PROPOSE				x
LONGUEUR				x
HAUTEUR				x
PRECISION				x
TEMPS MAXIMAL			x	x
TEMPS ILLIMITE				
NOUVELLES DIRECTIVES	x			
CALCUL	x			

ANNEXE C

PRINCIPAUX PROBLEMES POUR LESQUELS IL EXISTE UNE FONCTION EFPE

N° problème	Nom de code	Nature
366	A5EFFE	Approximation par une série de puissances

$$f_1 = \sum_{j=1}^N x_j t_1^{k+j-1}$$

- . k = XA (2) : puissance d'origine
- . Nombre d'inconnues variable de 1 à 10.

N° problème	Nom de code	Nature
368	C5EFFE	Intensité critique à angle fixe en fonction de la température

$$f_1 = x_1 + x_2 (t_1 - x_a(1))^{x_3} .$$

N° problème	Nom de code	Nature
369	D3EFFE	Largeur des spectres diffusés approchés par une lorentzienne + une composante élargie

$$f_1 = x_6 + \frac{x_1}{x_3^2 + (t_1 - x_2)^2} + \int \frac{x_4}{x_5^2 + (t_1 - \theta - x_2)^2} \cdot \frac{1}{x_7 \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\theta^2}{2x_7^2}} d\theta$$

x_1	intensité	} de la lorentzienne
x_2	position	
x_3	largeur	
x_4	intensité	} de la composante élargie
x_5	largeur	
x_7	importance de l'élargissement	
x_6	hauteur du fond continu	

N° problème	Nom de code	Nature
370	E7EFFE	Coefficients d'anisotropie magnétique

$$f_1 = -x_1 \left(\frac{\sin 2t_1}{4} + \frac{3}{8} \sin 4t_1 \right) - x_2 \left(\frac{1}{64} \sin 2t_1 + \frac{4}{64} \sin 4t_1 - \frac{3}{64} \sin 6t_1 \right)$$

N° problème	Nom de code	Nature
374	I3EFFE	Estimation de la susceptibilité (paramètre γ) à partir des largeurs des spectres diffusés.

$$f_1 = \sqrt{x_1 + x_2 (t_1 - x_4)^{x_3}}$$

x_4 température de NEEL

N° problème	Nom de code	Nature
375	J5EFFE	Coefficients d'ordre magnétique à courte distance
$f_1 = \frac{1}{c_1} \left[\frac{t_1 - t_N}{t_1 - t_N} x_1 + \frac{t_1 - t_1}{t_N - t_1} x_2 + \sum_{j=3}^n x_j \frac{\sin \rho c_j}{\rho c_j} \right]$		
avec $\rho = \frac{4\pi}{c_2} \sin \frac{\pi}{360} t_1$		
	c_1	norme absolue
	c_2	longueur d'onde en Angstroems
	x_1	hauteur du fond continu à gauche
	x_2	hauteur du fond continu à droite
	x_j à x_n	coefficients d'ordre magnétique
	t_1	1ère abscisse angulaire expérimentale en degrés(2 θ)
	t_i	ième abscisse angulaire expérimentale en degrés(2 θ)
	t_N	dernière abscisse angulaire expérimentale en degrés(2 θ).

N° problème	Nom de code	Nature
376	K5EFFE	Séparation analytique de doublets de réflexion des rayons X sur cristaux quadratiques.

$$f_1 = C_1 \left[\frac{t_1 - t_N}{t_1 - t_N} x_1 + \frac{t_1 - t_1}{t_N - t_1} x_2 + \frac{x_3}{\pi} \varphi_1 \right]$$

t_1 est la 1ère abscisse angulaire expérimentale en degrés 2 θ

t_1 la ième

t_N la dernière

x_1 la hauteur du fond continu à gauche

x_2 la hauteur du fond continu à droite

C_1 est la correction de LORENTZ et de polarisation

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2} \cos(c_0 t_1) [1 - \cos^2(c_0 t_1)]} - \sqrt{2} \cos(c_0 t_1)$$

où $c_0 = \pi/360$

$$\varphi_1 = \frac{1}{1 + \left[\frac{\sin(c_0 t_1) - \sin(c_0 x_4)}{x_5} \right]^2} + \frac{1/2}{1 + \left[\frac{\sin(c_0 t_1) - c_1 \sin(c_0 x_4)}{x_5} \right]^2} + \frac{c_2}{1 + \left[\frac{\sin(c_0 t_1) - \sin(c_0 x_6)}{x_5} \right]^2} + \frac{c_2/2}{1 + \left[\frac{\sin(c_0 t_1) - c_1 \sin(c_0 x_6)}{x_5} \right]^2}$$

où

x_4 est la position angulaire de la 1ère composante $k\alpha_1$

x_5 la largeur commune de chaque composante

x_6 la position angulaire de la 2ème composante $k\alpha_1$

$C_1 = \text{XA}(1)$ rapport $\lambda_{k\alpha_2} / \lambda_{k\alpha_1}$; $C_2 = \text{XA}(2)$ rapport I_2 / I_1

$C_3 = \text{XA}(3)$ période de la base de temps ; $C_4 = \text{XA}(4)$ temps mort du détecteur de particules

N° problème	Nom de code	Nature
378	M5EFFE	Estimation des paramètres réticulaires d'un cristal quadratique, et de l'excentricité de l'échantillon
$f_1 = 1 - \cos t_1 = \left(\frac{h_1^2 + k_1^2}{2 x_1^2} \right) \frac{\lambda^2}{2 x_1^2} + \ell_1^2 \frac{\lambda^2}{2 x_2^2} + x_3 \sin^2 t_1$		
avec $t_1 = 2\theta_1$ $h_1 = XA(1,1)$, $k_1 = XA(1,2)$, $\ell_1 = X(1,3)$ $\lambda = XA(500)$ longueur d'onde $x_1 =$ paramètre a $x_2 =$ paramètre c $x_3 =$ excentricité (en % du rayon de la chambre)		

N° problème	Nom de code	Nature
379	N3EFFE	Angles de diffraction des ondes avec une poudre de cristaux tricliniques observée au diffractomètre
$f_1 = \frac{360}{\pi} \arcsin\left(\frac{\lambda}{2} \sqrt{Q}\right) + x_4 t_1$		
t_1 : angle en degrés 2θ $\lambda = XA(1500)$: longueur d'onde en angstroem x_7 : position de l'échantillon en degrés (déplacement des raies aux petits angles) $t_1 = \cos\left(\frac{\pi}{360} y_1\right)$ y_1 : position observée de la ième raie		

$$Q = \sum_{i=1}^3 H_i \left[H_i + H_{i+1} C_{i+2} \right]$$

$$H_1 = H_4 = a_1^* h(1,1)$$

$$H_2 = H_5 = a_2^* h(1,2)$$

$$H_3 = H_6 = a_3^* h(1,3)$$

où

$h(1,1)$: indice h de la i ème raie

$h(1,2)$: indice k de la i ème raie

$h(1,3)$: indice ℓ de la i ème raie

$$a_1^* = \frac{x_2 x_3 \sin \alpha_1}{V}$$

$$a_2^* = \frac{x_3 x_1 \sin \alpha_2}{V}$$

$$a_3^* = \frac{x_1 x_2 \sin \alpha_3}{V}$$

x_1 paramètre a
 x_2 paramètre b
 x_3 paramètre c

} en angstroems

$$\alpha_1 = \frac{\pi}{180} x_4$$

$$\alpha_2 = \frac{\pi}{180} x_5$$

$$\alpha_3 = \frac{\pi}{180} x_6$$

x_4 angle α
 x_5 angle β
 x_6 angle γ

} en degrés

$$V = 2 x_1 x_2 x_3 / \sin(s_0) \sin(s_1) \sin(s_2) \sin(s_3)'$$

$$s_0 = [\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3] / 2$$

$$s_1 = s_0 - \alpha_1 \quad s_2 = s_0 - \alpha_2 \quad s_3 = s_0 - \alpha_3$$

$$C_1 = C_4 = 2 \frac{\cos \alpha_2 \cos \alpha_3 - \cos \alpha_1}{\sin \alpha_2 \sin \alpha_3}$$

$$C_2 = C_5 = 2 \frac{\cos \alpha_3 \cos \alpha_1 - \cos \alpha_2}{\sin \alpha_3 \sin \alpha_1}$$

$$C_3 = C_6 = 2 \frac{\cos \alpha_1 \cos \alpha_2 - \cos \alpha_3}{\sin \alpha_1 \sin \alpha_2}$$

N° problème	Nom de code	Nature
381	P1EFFE	Détermination de la section efficace, du niveau énergétique et de la largeur de ce niveau dans l'interaction électron-plasmon

$$f_1 = x_1 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x_2^n}{n!} \frac{1}{\sqrt{2\pi (x_5^2 + n x_6^2)}} e^{-\frac{(x_3 + n x_4 - t_1)^2}{2 (x_5^2 + n x_6^2)}}$$

- f_1 : intensité reçue pour l'énergie t_1
 x_1 : flux sortant total
 x_2 : section efficace par unité de surface
 x_3 : énergie du faisceau incident
 x_4 : énergie du plasmon
 x_5 : largeur du niveau du faisceau incident
 x_6 : largeur du niveau du plasmon

ANNEXE D

ETUDE DE LA CONVERGENCE DU DEVELOPPEMENT AU 2^{ème} ORDRE

MM. Gaugenot, Guillou, Lago (1961) avaient proposé l'utilisation des dérivées secondes et montré que leur emploi dirigeait la convergence (si elle existait) vers la solution. L'étude ci-dessous montre que le rayon de convergence peut, par contre, être notablement réduit.

Soit $y = f(x)$ une fonction de x . Nous cherchons à minimiser

$$\varepsilon = [f(x) - y]^2.$$

Autrement dit, en partant de $x = x_0$, nous cherchons x_1 qui minimise ε .

Notations :

$$f = f(x_0)$$

$$f_1 = \frac{\partial}{\partial x} f(x_0)$$

$$f_2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x_0)$$

$$dx = x_1 - x_0.$$

Calcul de x_1

Nous pouvons écrire : $f(x_1) = f + dx f_1 + \frac{dx^2}{2} f_2 + \dots$

$$\begin{aligned} \varepsilon = y^2 - 2y f - 2 dx y f_1 - dx^2 y f_2 - \frac{dx^3}{3} y f_3 + 2 dx f f_1 + \\ + f_2 + dx^2 (f_1^2 + f f_2). \end{aligned}$$

En décrivant ε par rapport à x

$$\frac{d}{dx} \varepsilon = -y f_2 + f f_1 + x [f f_2 + f_1^2 - y f_2]$$

Donc

$$x_1 = x_0 + \frac{y - f}{f_1} \cdot \frac{1}{1 - \left(\frac{y - f}{f_1} \right) f_2} \cdot$$

Nous pouvons toujours supposer $y = 0$. La formule devient :

$$x_1 = x_0 - \frac{f f_1}{f f_2 + f_1^2} \quad (1)$$

Exemple de divergence

Prenons par exemple :

$$f(x) = \frac{x^2}{x^2 + 1} \quad (\text{Minimum } f = 0 \text{ pour } x = 0)$$

alors

$$f_1 = \frac{2x_0}{(x_0^2 + 1)^2}$$

$$f_2 = 2 \frac{1 - 3x_0^2}{(x_0^2 + 1)^3}$$

Compte tenu de (1)

$$x_1 = x_0 \left[1 + \frac{x_0^2 + 1}{3x_0^2 - 3} \right]$$

Si

$$\frac{x_0^2 + 1}{3x_0^2 - 3} > 0$$

(2)

$$\text{ou si } \frac{x_0^2 + 1}{3x_0^2 - 3} < -2 \quad (3)$$

$$\text{alors } |x_1| > |x_0|$$

$$(2) \text{ équivaut à } |x_0| > 1 .$$

La condition (3) ne peut donc être remplie que si $|x_0| < 1$, soit $3x_0^2 - 3 < 0$.

$$\text{Elle s'écrit alors : } x_0^2 + 1 > -6x_0^2 + 6 ,$$

$$\text{soit , } 1 > |x_0| > \sqrt{\frac{5}{7}} .$$

Ainsi, dès que $|x_0| > \sqrt{\frac{5}{7}}$, $|x_1| > |x_0|$: il y a donc divergence.

Si $x_0 = \sqrt{\frac{5}{7}}$, $x_1 = -x_0$, il y a cyclage.

Sans les dérivées secondes, le système s'écrit :

$$x_1 = x_0 \left[1 - \frac{x_0^2 + 1}{2} \right]$$

$$|x_1| \text{ n'est supérieur à } |x_0| \text{ que pour } x_0 > \sqrt{3} .$$

Ainsi, dans ce cas particulier, le rayon de convergence est fortement diminué par l'adjonction des dérivées secondes : il passe de $\sqrt{3}$ à $\sqrt{\frac{5}{7}}$, soit environ de 1,732 à 0,845.

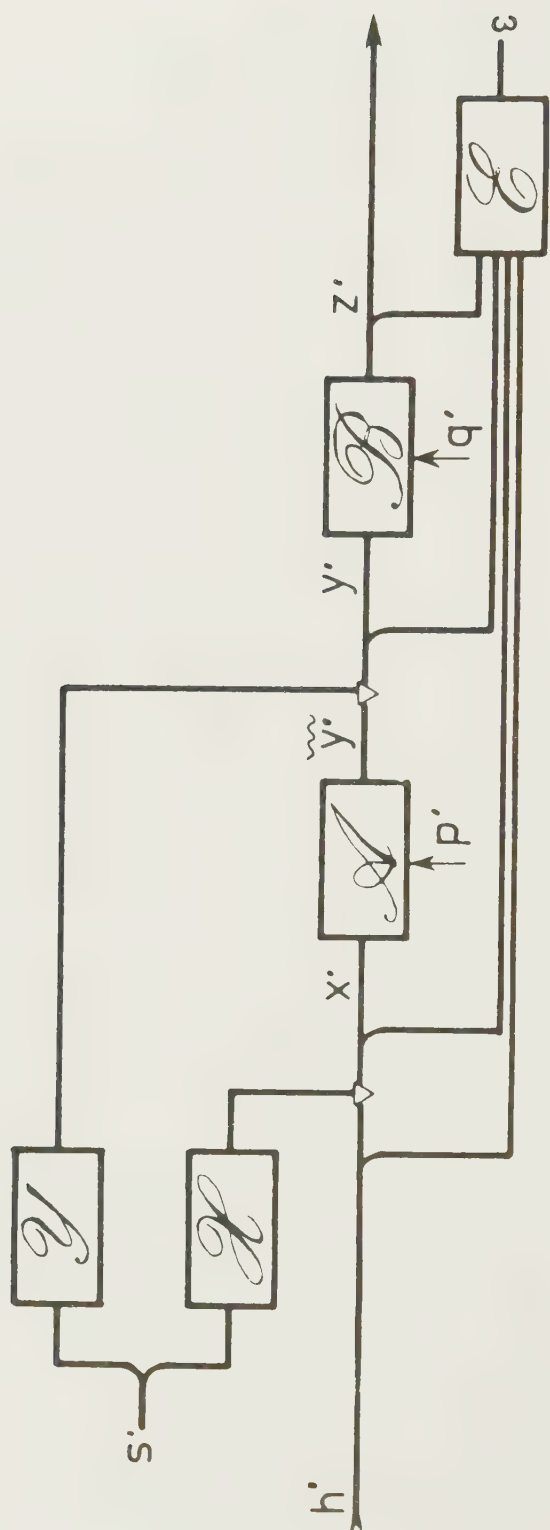


Fig.1 Schéma de principe d'une chaîne de mesure

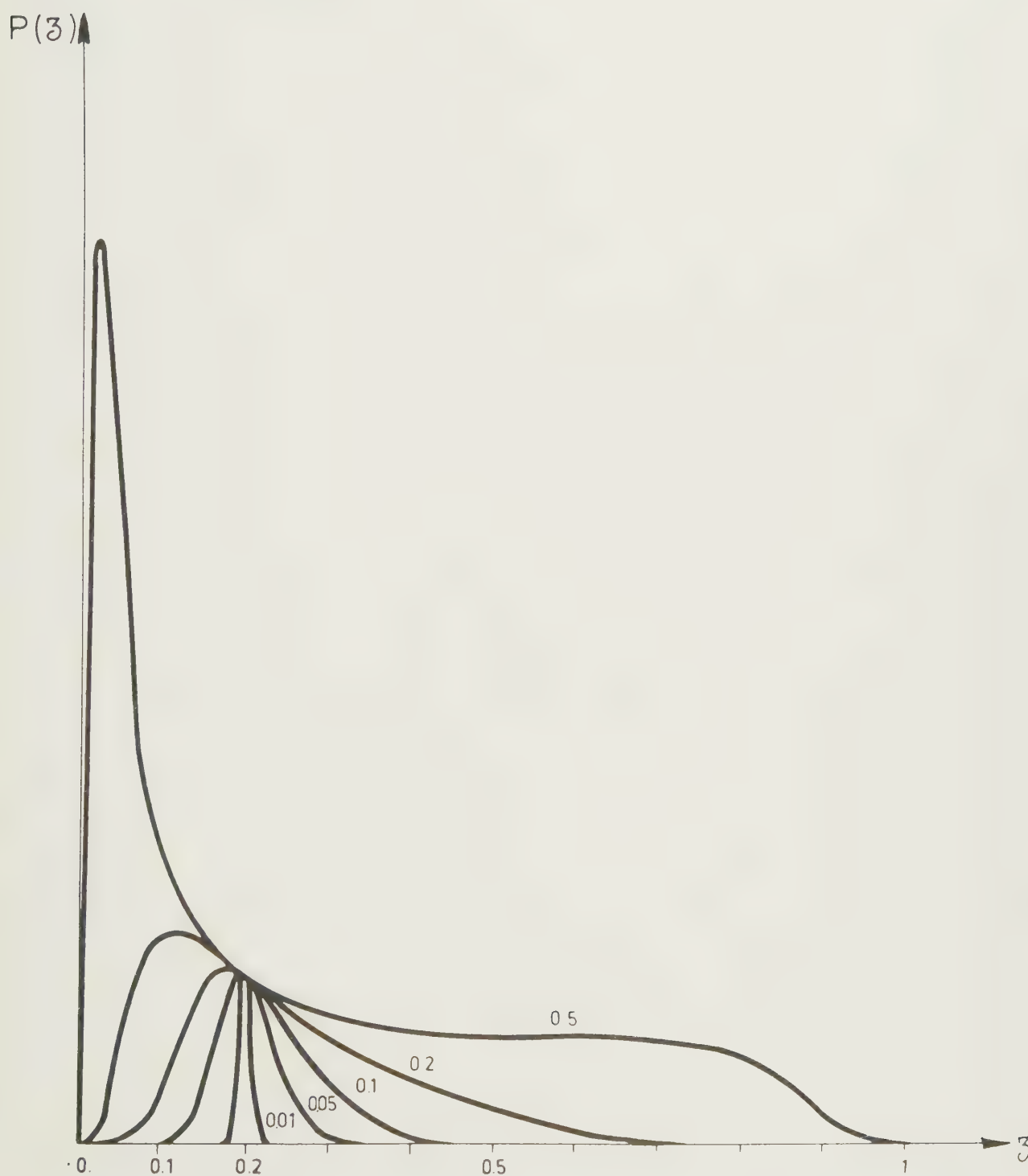


Fig.2 Courbe de densité de probabilité d'une variable z définie dans l'intervalle $[0,1]$ pour diverses incertitudes à priori la valeur centrale étant $x_c = 0.2$

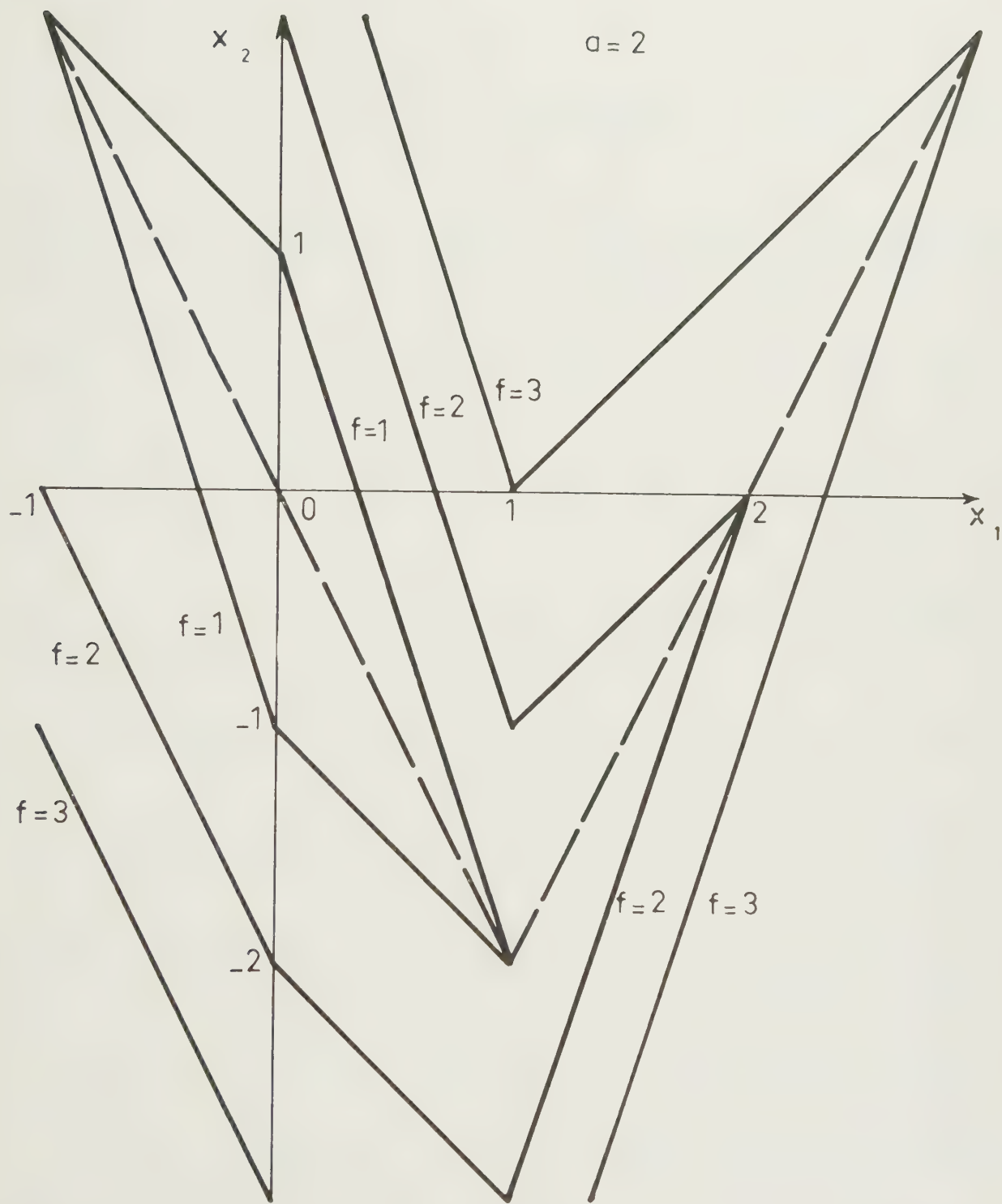


Fig.3: Lignes des niveaux de $f(x_1, x_2) = |x_2 - a||x_1 - 1| + a| + |x_1|$

BIBLIOGRAPHIE

E.V. BARANKIN et R. DORFMANN (1958) "On quadratic programming" Univ. California Publication in Statistics 2, 285-318.

F. BIBIAN (1965) "La méthode du simplexe" Actes du Colloque sur les Calculs Cristallographiques - Grenoble.

M.J. BOX (1966) "A comparison of several current optimization methods and the use of transformations in constrained problems" The Computer Journal, 9, N° 1, 67.

G.B. DANTZIG (1949) "Programming of Interdependent Activities, II, Mathematical Model" Econometrica 17, N° 3, 220 ; N° 4, 211.

G.B. DANTZIG (1951) "Maximisation of a linear function of variables subject to linear inequalities" Chap. XXI dans Koopmans et Tjalling (1951)

G.B. DANTZIG (1966) "Applications et prolongements de la programmation linéaire" Dunod (Paris).

M. FRANCK et P. WOLFE (1956) "An algorithm for quadratic programming" Naval Res. Log. Qu. 3, 95-110.

J. GAUGENOT, A. GUILLOU et B. LAGO (1961) Rapport SCEA n° 106 - C.E.N.S.

K.F. GAUSS (1809) Theoria motus corporum coelestium (Hamburg).

K.F. GAUSS (1810) Disquisitio de elementis ellipticis Palladis.

K.F. GAUSS (1821) Theoria combinationis observationum erroribus minimis obnixiae.

B. JACROT, G..PARETTE et USHA (1966) - A paraître.

T.C. KOOPMANS et C. TJALLING (Edit) (1951) "Activity analysis of production and allocation" Monograph n° 13 of the Cowles Commission - New-York.

P.S. LAPLACE (1812) Theorie analytique des probabilités (Paris).

R. LATTES (1956) Rapport SPM n° 173 - C.E.N.S.

A.M. LEGENDRE (1806) Nouvelles méthodes pour la determination des orbites des comètes (Paris).

E. LEMKE - CARLTON (1954) "The dual method of solving the linear programming problem" Naval Res. Log. Qu. 1, 36-47.

Y.V. LINNIK (1963) "Methode des moindres carrés" Dunod (Paris).

J.A. NELDER et R. MEAD (1965) "A simplex method for function minimization", The Computer J., 7, 308-313.

W.SPENDLEY, G.R. HEXT et F.R. HIMSWORTH (1962) "Sequential application of simplex designs in optimisation and evolutionary operation" Technometrics, 4, 441.

M. TOURNARIE (1955) "L'inversion du produit de composition en physique" C.R. Acad. Sci. 241, 1923.

M. TOURNARIE (1956) "Considérations sur l'histogramme des fonctions, notamment dans l'inversion du produit de composition" C.R. Acad. Sci. 242, 2509.

M. TOURNARIE (1957) "Pratique de l'inversion du produit de composition de fonctions histographiées. C.R. Acad. Sci. 245, 1301.

M. TOURNARIE (1958 a) "Méthode générale de correction des effets instrumentaux appliquée à l'interprétation des diagrammes de rayons X". Bull. Soc. Française Miner. et Crist. 81, 278.

M. TOURNARIE (1958 b) "Théorie et applications d'un critère généralisé d'optimisation" Actes du 2^{ème} Congrès International de Cybernétique. Namur.

M. TOURNARIE (1959) Thèse (Paris).

M. TOURNARIE (1964 a) "Le sens de la mesure" Bull. Soc. Scient. de Bretagne 39, 148.

M. TOURNARIE (1964 b) "Applications du principe d'antagonisme" Actes du 4^{ème} Congrès International de Cybernétique. Namur.

M. TOURNARIE (1964 c) "Le lissage optimisé" J. de Phys. 25, 909.

M. TOURNARIE (1965) "Intercorrections" Actes du Colloque sur les Calculs Cristallographiques - Grenoble.

M. TOURNARIE (1966 a) "Principe, conséquences et applications de l'algorithme optimal" Actes du 7^{ème} Congrès International de Cristallographie - Moscou.

M. TOURNARIE (1966 b) "Exploitation d'une observation isolée pour l'estimation de plusieurs inconnues" (à paraître).

N. WIENER (1930) Acta Math. 55, 118.

N. WIENER (1942) "The extrapolation, interpolation and smoothing of stationary time series" NDRC Report, Cambridge.

Réédité "... with engineering applications"

John Wiley et Sons, Inc., New-York (1949).

P. WOLFE (1958) "The Simplex method for quadratic programming" *Econometrica* 27, 382-398.

DEUXIEME THESE

Proposition donnée par la Faculté :

"STRUCTURE ELECTRONIQUE DES METAUX DE TRANSITION"

Vu et approuvé

Nancy, le 1966

Le Doyen de la Faculté
des Sciences

J. AUBRY

le 21 Septembre 1966

Vu et permis d'imprimer

Nancy, le 1966

Le Recteur de l'Académie
Président du Conseil
de l'Université

P. IMBS

le 23 Septembre 1966

